

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO
REACTIVO
NUMA CÂMARA DE COMBUSTÃO**

Orlando do Nascimento Cruz e Silva

Orientador de tese:

Pedro Jorge Martins Coelho

Dissertação apresentada à Universidade de Évora para
a obtenção do grau de doutor em Física

Esta tese não inclui as críticas e sugestões feitas pelo júri

Évora - 2003

Índice

Resumo	4
Agradecimentos	6
1 Introdução	7
1.1 O estudo da combustão	7
1.2 O problema em estudo	10
1.3 Objectivos	11
1.4 Revisão bibliográfica	12
1.5 Conteúdo da tese	19
2 Equações de transporte	21
2.1 Equação de transporte da fracção mássica	22
2.1.1 Cinética química	23
2.2 Equação de conservação da massa	24
2.3 Equação de conservação da fracção de mistura	24
2.4 Equação de conservação do momento linear	25
2.5 Equação de conservação da energia	25
2.6 As equações de escoamentos reactivos em regime turbulento	27
3 Modelos físicos de turbulência, combustão e radiação	31
3.1 Modelo de turbulência	32
3.1.1 Modelo de turbulência $k - \varepsilon$	33
3.2 Modelo de combustão	36
3.2.1 Mecanismo de reacção química	37
3.2.2 Cálculo da composição química	41
3.2.3 Modelo das <i>flamelets</i> laminares	43
3.2.4 A interacção da combustão com a turbulência	46
3.3 Modelo de radiação	52
4 Modelo matemático	57
4.1 As equações de transporte em coordenadas curvilíneas não ortogonais . . .	58

4.2	Discretização das equações de transporte	60
4.2.1	Discretização das variáveis independentes	61
4.2.2	Discretização dos fluxos convectivos	64
4.2.3	Discretização dos fluxos difusivos	64
4.2.4	Discretização dos termos fonte e dos termos dependentes do tempo	66
4.2.5	Discretização da equação de conservação da massa	67
4.2.6	Discretização das equações de transporte das variáveis escalares	67
4.2.7	Discretização das equações de transporte das componentes da velocidade	67
4.2.8	Cálculo das variáveis dependentes nas faces	68
4.2.9	Condições de fronteira	68
4.3	Método de solução	70
4.3.1	Cálculo do termo convectivo	71
4.3.2	Método <i>SIMPLE</i> de solução das equações discretizadas	74
4.3.3	Relaxação	77
4.3.4	Crítério de convergência	77
4.3.5	Método de cálculo iterativo	78
4.3.6	Método de solução	78
5	Simulação de escoamentos sem reacção química	80
5.1	Escoamento laminar numa geometria complexa	81
5.1.1	O caso em estudo	81
5.1.2	Modelo utilizado e comparação de resultados	82
5.2	Escoamento laminar em cavidade com parede em movimento tangencial	87
5.2.1	O caso em estudo	87
5.2.2	Modelo utilizado e comparação de resultados	88
5.3	Jactos confinados axi-simétricos num difusor	94
5.3.1	O caso em estudo	94
5.3.2	Modelo utilizado e comparação de resultados	96
5.4	Jactos coaxiais turbulentos com rotação em tubo com expansão súbita	99
5.4.1	O caso em estudo	99
5.4.2	Modelo utilizado e comparação de resultados	102
6	Simulação de uma câmara de combustão	109
6.1	Descrição da geometria e regime de operação	110
6.2	A simulação do escoamento com combustão	112
6.2.1	Métodos usados na simulação	112
6.2.2	Composição das <i>flamelets</i> laminares	114
6.2.3	Resultados e discussão	118
7	Conclusões	140
7.1	Trabalho realizado	140
7.2	Propostas de trabalho futuro	143

Nomenclatura	145
Bibliografía	151

Resumo

O estudo da combustão turbulenta gasosa numa câmara com duas alimentações separadas de oxidante e combustível é efectuado neste trabalho com recurso a métodos numéricos.

A descrição do escoamento recorre a equações diferenciais de transporte baseadas na dinâmica de fluidos, em que os fluxos difusivos são expressos em termos dos gradientes das grandezas que originam esses fluxos. As equações de transporte são representadas em coordenadas de espaço curvilíneas não ortogonais e utilizam as componentes cartesianas da velocidade. As taxas de criação e destruição de espécies químicas são determinadas por meio de expressões com forma análoga à de Arrhenius.

Os modelos utilizados na descrição dos fenómenos incluem um mecanismo de reacção química detalhada, o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ clássico e a sua versão *RNG* e um modelo de radiação de meio opticamente fino. Os fluxos nas paredes são determinados com base nas denominadas funções de parede, que permitem ultrapassar a não validade do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ para valores baixos do número de Reynolds. A interacção da turbulência com as reacções químicas é modelada calculando a composição química média por aplicação de funções densidade de probabilidade presumidas, assumindo que a composição química instantânea da chama turbulenta é descrita pelo modelo de *flamelets* laminares. As características das *flamelets* são calculadas por equações diferenciais aproximadas da combustão laminar, em que a variável independente indica a composição química e um outro parâmetro presente nas equações, a taxa de dissipação escalar, tem em conta o efeito da turbulência na deformação da frente da chama.

A determinação das grandezas que descrevem o escoamento com combustão é efectuada com recurso a métodos numéricos. As equações de transporte são transfor-

madadas em equações algébricas por intermédio da discretização das equações de transporte pelo método dos volumes finitos. A forma das equações de transporte utilizadas permite a discretização em malhas ajustadas a geometrias complexas. O sistema de equações algébricas é resolvido iterativamente pelo método de Gauss-Seidel. O cálculo da pressão é feito utilizando o método *SIMPLE*. O cálculo dos fluxos convectivos é feito utilizando os esquemas híbrido e *MUSCL*.

Estes modelos e métodos são inicialmente aplicados ao cálculo de escoamentos sem reacção química com características diversas em termos de regime de escoamento, geometria e condições de fronteira. Os resultados destes cálculos são considerados satisfatórios, permitindo a validação dos métodos usados.

A câmara de combustão estudada, tendo geometria próxima da cilíndrica, foi modelada em duas dimensões com simetria cilíndrica. As simulações efectuadas basearam-se na combinação de diversos modelos e malhas de diferentes refinamentos. Os resultados reproduzem aproximadamente os dados experimentais e a sua qualidade é semelhante a outros estudos efectuados com modelações diversas.

Agradecimentos

Sem nomear todos quantos foram importantes na realização deste trabalho, são devidos agradecimentos especiais a várias pessoas, sem cujo apoio a sua realização não teria sido possível.

Agradeço ao Prof. Pedro Coelho a supervisão, disponibilidade e aconselhamento ao longo de todo o trabalho.

Aos profissionais da equipa de Cardiologia do H.S.M. pela competência e atenção que possibilitaram a existência destes agradecimentos. À equipa de Medicina III, e em especial à Dra Fernanda Rego, cuja intervenção e eficácia tornaram possível, entre outras coisas, tudo o que está escrito.

Capítulo 1

Introdução

A combustão ocorre em diversas circunstâncias de forma não controlada, por exemplo em incêndios florestais e urbanos, e de forma controlada em equipamentos construídos para fornecimento de energia e trabalho.

O domínio do fogo e as tecnologias associadas ao seu controlo vêm sendo desenvolvidos desde os períodos em que a sua ignição e preservação constituíam o objectivo principal até à actualidade, em que as aplicações industriais e outras utilizam conhecimentos de diversas áreas científicas dedicados ao estudo da combustão.

1.1 O estudo da combustão

O conjunto de fenómenos estritamente associados à ocorrência de reacções químicas exotérmicas entre substâncias diferentes é designado genericamente por combustão. A esta definição corresponde uma grande variedade de situações, que podem ser classificadas em termos de parâmetros diversos. Classificações usuais consideram o estado de agregação dos reagentes – sólidos, líquidos e gasosos –, o regime de evolução no tempo, o grau de confinamento, a pressão a que ocorrem as reacções, a compressibilidade dos fluidos em combustão, o regime laminar ou turbulento do escoamento da mistura reactiva, o grau de mistura dos reagentes nas alimentações, as características de emissão radiativa, a influência do campo gravítico, entre outras. O interesse destas classificações reside no facto de que a combustão não é estudada de forma única para todos os casos. As abordagens assumem formas diferenciadas em função das características dos fenómenos da combustão e também

das interferências entre estes fenómenos.

A determinação das características dum escoamento com combustão pode ser feita por via experimental. Actualmente, as técnicas experimentais estão suficientemente desenvolvidas para se poderem, salvo dificuldades de geometria, determinar com uma certa precisão a velocidade, temperatura e composição química no interior duma chama, mesmo sem recorrer a métodos intrusivos. Algumas das características que interessa conhecer são, por exemplo o campo da temperatura, a extensão da chama, a potência térmica libertada e a composição química dos produtos da reacção, particularmente as concentrações de poluentes na zona de escape.

No processo de desenvolvimento de uma unidade de combustão eficiente é geralmente necessário efectuar um certo número de alterações na geometria e condições de funcionamento. O processo de desenvolvimento com recurso intensivo a métodos experimentais pode assim tornar-se dispendioso e demorado. Também na previsão e no estudo das características de incêndios, os métodos experimentais são muitas vezes impraticáveis.

Em alternativa à experimentação, a utilização dos princípios físicos de conservação, aliados a dados experimentais gerais do comportamento químico e radiativo, pode servir de base à construção de modelos matemáticos que permitam descrever os escoamentos reactivos. A descrição teórica da combustão requer a capacidade de prever a evolução dos fenómenos e por isso normalmente se baseia em leis físicas e químicas comprovadas. Os princípios de conservação da massa, do momento linear e da energia são fundamentais para a descrição da evolução de sistemas físicos. Os princípios físicos referidos assumem a forma de equações diferenciais cuja solução permite em princípio prever a forma do escoamento.

Nos escoamentos com combustão, as espécies químicas reagem entre si com apreciável produção de energia térmica, variação da temperatura e emissão de radiação. A variação de temperatura produz alterações nas propriedades do fluido (massa volúmica, calor específico, coeficientes de difusão, e de emissão e absorção de radiação), tendo efeitos sobre a velocidade, pressão e transporte de calor. Os valores locais das variáveis do escoamento têm por sua vez influência nos fluxos das espécies químicas e nas taxas de reacção. Todos estes fenómenos devem ser incorporados nas equações diferenciais que descrevem o transporte de diversas grandezas. As equações deverão ser resolvidas de forma a descrever e prever os fenómenos que ocorrem nos escoamentos com combustão. Em geral interessa

determinar os campos de velocidade, pressão, concentrações químicas e temperatura.

Estes sistemas de equações não são no entanto resolúveis analiticamente. As únicas abordagens a estas equações que conduzem a resultados realistas consistem na aplicação de métodos que transformam as equações diferenciais em equações algébricas, permitindo o uso de computadores para o cálculo das variáveis dependentes.

Ainda assim, o sistema de equações algébricas que se obtém a partir das equações diferenciais de conservação não pode geralmente ser usado, com os computadores actuais, na simulação numérica directa de escoamentos reactivos turbulentos. As escalas de espaço e de tempo em que os fenómenos de transporte e reactivos ocorrem variam desde a escala integral do sistema em estudo até às escalas de Kolmogorov, inferiores àquelas em várias ordens de grandeza, pelo que a quantidade de informação a ser processada em tempo útil ultrapassa a capacidade de qualquer computador actual.

Esta limitação é geralmente ultrapassada desenvolvendo, a partir das equações diferenciais de transporte das variáveis instantâneas, outras equações diferenciais em igual número, em que as variáveis dependentes são valores médios das variáveis instantâneas. Nestas equações surgem novos termos que incluem variáveis cuja determinação exacta é impossível. O fecho do sistema de equações é efectuado com recurso a aproximações designadas por modelos de turbulência. Estes são modelos semi-empíricos que permitem calcular de forma aproximada os termos desconhecidos. Estes modelos reflectem o efeito de fenómenos ocorrendo nas escalas menores sobre o transporte de grandezas nas escalas de cálculo que são de interesse nas aplicações.

Outros modelos necessários para viabilizar a simulação numérica da combustão gasosa em regime turbulento são modelos de reacções químicas, radiação e de interacção entre estes fenómenos e a turbulência. O modelo químico limita o número de reacções químicas importantes e estabelece as expressões das taxas de reacção, enquanto o modelo de radiação consiste em formas simplificadas de cálculo das trocas de energia radiativa. Os modelos de interacção permitem ultrapassar dificuldades no cálculo das trocas de energia radiativa e das taxas de reacção em misturas em escoamento turbulento.

A forma geralmente usada para obter as equações algébricas de transporte tem por base a discretização dos domínios das variáveis independentes, de tempo e de espaço, das equações diferenciais. A solução daquelas equações pode ser obtida por intermédio de diversos métodos numéricos que frequentemente são específicos da área da dinâmica de

fluidos.

Devido à quantidade dos cálculos envolvidos, o computador como meio de cálculo é indispensável. Em conjunto com as motivações económicas, militares e ambientais, a evolução dos computadores permitiu o grande desenvolvimento do estudo da combustão que se verificou nas últimas décadas.

1.2 O problema em estudo

Os fenómenos que ocorrem num escoamento turbulento com reacções químicas e transporte radiativo no interior de uma câmara de combustão são descritos por modelos físicos e químicos. Estes modelos têm capacidade suficiente para servirem de base a um modelo matemático constituído por um conjunto de equações algébricas solúveis. A solução numérica deste conjunto de equações permite determinar os campos das variáveis que descrevem os fenómenos. Estes resultados numéricos podem ser comparados com os dados de observações experimentais. O problema em estudo consiste na simulação do escoamento reactivo numa câmara de combustão fisicamente existente. A confrontação dos resultados numéricos com dados experimentais permite analisar a capacidade descritiva e preditiva do conjunto de modelos e métodos utilizados.

A câmara de combustão (descrita com maior detalhe no capítulo 6) é constituída essencialmente por um corpo prismático octogonal com dimensões aproximadas de $2m$ de altura e $1m$ de largura, com um queimador introduzindo ar e gás natural não pré-misturados, sendo o ar introduzido com movimento de rotação (*swirl*). O escoamento ocorre em regime turbulento estacionário a pressões próximas da atmosférica em toda a câmara. A potência térmica libertada na combustão é de aproximadamente $300kW$.

Os modelos utilizados para a simulação da combustão turbulenta não pré-misturada permitem obter, entre outros, os campos dos valores médios das seguintes variáveis: componentes da velocidade, pressão, temperatura e fracções mássicas das espécies químicas consideradas nas reacções.

Os modelos utilizados serão testados em simulações de vários escoamentos sem reacção química laminares e turbulentos, gerados por gradientes de pressão e por tensões viscosas, com e sem *swirl*, exibindo ou não vórtices secundários e descolamento, em geometrias de contornos planos e curvilíneos. A existência de dados experimentais e numéricos

detalhados para os escoamentos laminares e turbulentos não reactivos permite avaliar a capacidade de simulação dos modelos e métodos numéricos usados nos códigos de simulação numérica para escoamentos não reactivos. Para a combustão na câmara referida, existem publicados dados experimentais detalhados ([Kaufman *et al.*, 1994]), assim como resultados de simulações numéricas, o que permite avaliar a precisão dos resultados numéricos e analisar a adequação dos modelos usados na simulação.

1.3 Objectivos

No presente trabalho serão apresentados modelos e métodos usados na simulação numérica da combustão, que serão aplicados em simulações de escoamentos não reactivos e reactivos. Os objectivos consistem em analisar a capacidade de simulação de métodos relativamente simples e pouco exigentes em termos computacionais, aplicados a situações complexas em termos de escoamento e reacção química, nomeadamente a existência de geometrias complexas com turbulência, *swirl*, vórtices secundários e separação do escoamento, reacções químicas em fluidos com taxas de deformação variáveis e emissão de radiação.

As simulações efectuadas utilizam modelos que adoptam nalguns casos simplificações significativas em relação à realidade. O modelo de turbulência utilizado descreve os transportes turbulentos por uma aproximação difusiva isotrópica. O escoamento turbulento reactivo é considerado constituído por um conjunto de pequenas estruturas laminares, tornando possível descrever as estruturas químicas instantâneas do escoamento por intermédio de reacções químicas detalhadas com cálculos efectuados independentemente do escoamento real. O modelo de radiação aplicado considera apenas os transportes de energia radiativa entre o fluido e as paredes. O método numérico é utilizado num domínio bidimensional descrevendo um sistema cuja simetria geométrica, em termos estritos, não poderia descrever-se num único domínio de cálculo bidimensional.

Os resultados obtidos que serão apresentados, comparados com os dados experimentais e com resultados numéricos de modelos mais complexos, indicam no entanto que as simplificações utilizadas não afectam de forma sensível a qualidade dos resultados. Os modelos mais detalhados disponíveis actualmente para o cálculo de escoamentos reactivos com números de Reynolds elevados não conduzem geralmente a melhorias drásticas na

previsão destes fenómenos.

1.4 Revisão bibliográfica

A simulação da combustão turbulenta baseia-se em desenvolvimentos científicos fundamentais e aplicados nas áreas da termodinâmica, cinética química, radiação, dinâmica de fluidos e cálculo numérico. Nesta secção são referidos de forma sumária alguns desenvolvimentos históricos assim como desenvolvimentos relacionados com os modelos e métodos utilizados nesta tese. São ainda referidos estudos aplicados a câmaras de combustão relacionados com o presente estudo.

Actualmente são muito variados os métodos usados na simulação da combustão turbulenta. Entre o surgimento de certos modelos ou métodos e a sua aplicação habitual em estudos numéricos pode decorrer um tempo considerável. Os autores de simulações numéricas adoptam frequentemente modelos de turbulência, reacção química, interacção entre combustão e turbulência, radiação, assim como métodos numéricos, que podem ter sido desenvolvidos com bastante tempo de intervalo, por exemplo separados por três décadas. Tal pode dever-se, entre outras causas a: disponibilidade de meios de cálculo relacionada com o grau de exigência em termos de velocidade ou memória dos vários modelos ou métodos; facilidade de desenvolvimento dos códigos numéricos; nível de conhecimento de fenómenos e modelações envolvidos; grau de exigência em relação à qualidade dos resultados. As revisões bibliográficas orientadas para as aplicações e apresentadas com critérios cronológicos dispersar-se-ão por diversas áreas científicas. Qualquer apresentação orientada para as aplicações e com coerência interna terá omissões, ou será exaustiva, incluindo muitos aspectos pouco relevantes para a apreciação dos desenvolvimentos ou pouco interessantes para as aplicações.

A orientação escolhida é mista, incluindo desenvolvimentos históricos relevantes, desenvolvimentos de modelos e métodos em várias áreas com aplicação frequente, e algumas aplicações, quer as que se referem directamente ao objecto em estudo neste trabalho, quer as que incorporam alguns avanços em relação aos estudos seus contemporâneos. No entanto, esta apresentação bibliográfica não terá desenvolvimento suficiente para constituir uma síntese da história dos desenvolvimentos metodológicos fundamentais e aplicados destinados à simulação de câmaras de combustão. É antes sumária e constituída por algumas

referências importantes nos desenvolvimentos que possibilitam as simulações actuais.

A análise da dinâmica de fluidos evoluiu tardiamente em relação aos estudos da dinâmica de sólidos. A afirmação de [Newton, 1687] sobre a proporcionalidade entre diferenças de velocidade e força viscosa serviu de base à lei da viscosidade de Newton.

O princípio de conservação do momento linear aplicado a fluidos, admitindo a hipótese de que as tensões são funções lineares da taxa de deformação, conduziu às equações de Navier-Stokes ([Navier, 1827], [Poisson, 1831], [Saint Venant, 1843] e [Stokes, 1845]).

Numa análise dos escoamentos turbulentos, [Reynolds, 1895] deduziu equações de Navier-Stokes médias.

O transporte convectivo turbulento médio do momento linear é descrito por [Boussinesq, 1877] como um transporte difusivo na escala das velocidades médias, introduzindo o conceito de viscosidade turbulenta, no que pode ser considerado o primeiro modelo de turbulência sem resolução de equações de transporte adicionais dedicadas ao transporte turbulento.

A análise de escoamentos turbulentos baseia-se na resolução das equações de conservação da massa e momento linear (expressas em termos de velocidades médias). Na teoria do comprimento de mistura, [Prandtl, 1925] exprime a viscosidade turbulenta em termos do gradiente da velocidade média e dum parâmetro geométrico empírico. [Prandtl, 1945] acrescenta uma equação de transporte da energia cinética turbulenta k e exprime a viscosidade turbulenta em termos de k e de um parâmetro geométrico empírico, o que constitui o primeiro modelo de turbulência de uma equação.

[Kolmogorov, 1942] apresenta o primeiro modelo de turbulência de duas equações independente de parâmetros geométricos empíricos. Além das equações de conservação da massa e momento linear, o modelo inclui duas equações adicionais, nomeadamente de transporte de k e de uma frequência ω , relacionada com a taxa de dissipação de k .

[Harlow e Nakayama, 1967], [Hanjalic, 1970] e [Jones e Launder, 1972] apresentaram um sistema de duas equações para a energia cinética turbulenta e para a sua taxa de dissipação, a partir das quais pode determinar-se uma viscosidade efectiva em escoamentos turbulentos. Este método para simulação de escoamentos turbulentos denomina-se modelo $k - \varepsilon$ de turbulência. Na mesma época, [Spalding, 1971a] propõe um modelo de turbulência de duas equações de transporte de k e de W (grandeza relacionada com a variância da vorticidade), a partir das quais obtém a viscosidade turbulenta.

[Hanjalic e Launder, 1972] calculam as tensões de Reynolds por intermédio da resolução das suas equações de transporte. As correlações triplas que surgem com este modelo de turbulência são calculadas por expressões empíricas.

Uma das complexidades inerentes ao estudo da combustão consiste no acoplamento entre os fenómenos do escoamento e das reacções químicas. Numa das primeiras abordagens analíticas ao estudo da combustão, [Mallard e LeChatelier, 1883] determinaram uma expressão para a velocidade duma chama laminar pré-misturada em termos da taxa de reacção e da difusividade térmica.

As reacções químicas em escoamentos efectuam-se a taxas dependentes do transporte de espécies químicas e da cinética das reacções. Nas expressões da taxa de reacção química, [Arrhenius, 1889] incluiu um termo dependente da energia de activação. Numerosas tabelas de taxas de reacção determinadas experimental e teoricamente têm sido desenvolvidas com formas matemáticas baseadas na expressão de Arrhenius. Por exemplo o cálculo da oxidação do metano pode fazer-se com recurso ao mecanismo cinético de [Miller *et al.*, 1984].

[Burke e Schumann, 1928] analisaram uma chama laminar não pré-misturada fazendo uso de equações diferenciais de transporte de massa, velocidade e energia, obtendo soluções para as fracções mássicas na forma de séries de funções.

A simulação de escoamentos reactivos evoluiu desde os desenvolvimentos analíticos simplificados da cinética química e dos escoamentos, como por exemplo nos trabalhos de [Zeldovich, 1940], até aos primeiros desenvolvimentos com utilização de cálculo numérico computacional a partir das décadas de 60 e 70, em que a aplicação de modelos químicos, radiativos e de escoamento mais completos passou a ser possível.

Nos escoamentos turbulentos de fluidos não homogéneos, o cálculo das taxas médias de mistura requer o conhecimento estatístico das concentrações nas zonas de mistura. A evidência de baixas taxas de reacção em zonas em que as concentrações médias não o fariam prever, sugeriram a [Hawthorne *et al.*, 1949] a descrição das variações da composição instantânea por intermédio de uma gaussiana como função densidade de probabilidade das concentrações. A utilização nas equações de transporte e mistura de espécies químicas sem a introdução de termos correspondentes às flutuações das concentrações conduziram, até ao início da década de 70, a previsões irrealistas da composição química.

As abordagens numéricas da combustão turbulenta requerem o desenvolvimento

de modelos de reacção química em regime turbulento. O cálculo numérico da taxa média de reacção química em escoamento turbulento foi efectuado por [Pun e Spalding, 1967]. Consideraram uma reacção química instantânea de passo único na combustão sem pré-mistura. A taxa de reacção é condicionada pela taxa de mistura que depende de coeficientes de difusão turbulentos.

[Spalding, 1971a] introduziu uma função densidade de probabilidade composta por duas funções δ de Dirac, o que permitiu o cálculo da intermitência. Para o cálculo da composição química são resolvidas equações de transporte da média duma concentração e da sua variância. A comparação dos valores experimentais e calculados da concentração e sua flutuação, assim como da intermitência, indicam que as escolhas apropriadas das funções densidade de probabilidade são determinantes na descrição da mistura de espécies químicas em escoamentos turbulentos.

De acordo com dados experimentais, [Lockwood e Naguib, 1975] propuseram para a função densidade de probabilidade da fracção de mistura Z uma gaussiana truncada em $Z = 0$ e $Z = 1$, valores em que a densidade de probabilidade toma a forma de funções δ de Dirac. A reacção química foi considerada de passo único sem trocas radiativas. Os valores de Z e da sua variância são calculados por equações de transporte idênticas às de [Spalding, 1971a]. Considera-se que a entalpia é estritamente conservada e se relaciona linearmente com Z .

O modelo *EDM* ("Eddy Dissipation Model") para determinação da taxa de reacção média na combustão turbulenta foi introduzido por [Magnussen e Hjertager, 1976].

[Williams, 1975] apresenta o conceito de que a chama turbulenta pode, em certas condições, considerar-se constituída por um conjunto de *flamelets* laminares deformadas. A partir das equações de transporte da energia e das fracções mássicas, em chamas laminares deformadas, [Peters, 1984] deduziu equações diferenciais para variáveis escalares em termos da fracção de mistura e da taxa de dissipação escalar. Os valores médios das fracções mássicas podem ser calculados a partir dos seus valores instantâneos nas *flamelets* e das funções densidade de probabilidade da fracção de mistura e da taxa de dissipação escalar.

Substituindo os esquemas de reacção de passo único, [Seshadri e Peters, 1988] usaram mecanismos químicos reduzidos em que a determinação das concentrações pressupõe o equilíbrio químico ou o equilíbrio parcial.

Na análise dos escoamentos, reactivos ou não reactivos, os métodos numéricos para solução de equações diferenciais tornaram-se indispensáveis. Existem referências do início da utilização de métodos de diferenças finitas na China por volta do ano 790. [Euler, 1755] estabeleceu as bases modernas do cálculo das diferenças finitas. A solução de problemas de dinâmica de fluidos era obtida, na primeira metade do século XX, por meio de métodos analíticos aproximados, nomeadamente métodos de perturbação, métodos integrais e de análise dimensional. Embora os métodos de diferenças finitas fossem conhecidos, a sua aplicação era feita por cálculo manual, resolvendo as equações diferenciais de transporte discretizadas por meio de diferenças centrais. O método *upwind*, fisicamente justificado e numericamente estável, de discretização dos fluxos convectivos é devido a [Courant *et al.*, 1952].

A simulação numérica de escoamentos bidimensionais foi realizada na década de 60 por [Fromm e Harlow, 1963] resolvendo as equações da vorticidade e função corrente discretizadas por diferenças finitas. Simulações numéricas de escoamentos tridimensionais foram efectuadas por [Zuber, 1972]. [Patankar e Spalding, 1972] apresentam o método *SIMPLE* para o cálculo de pressão e velocidade em escoamentos tridimensionais.

Os estudos de câmaras de combustão podem actualmente ser efectuados recorrendo ao cálculo numérico para resolver equações de transporte tridimensionais das variáveis médias. Nos estudos aplicados a câmaras de combustão são utilizados métodos que possibilitam o cálculo do campo de pressão, modelos de turbulência, mecanismos de reacção química globais, reduzidos ou detalhados, modelos de interacção das reacções químicas com a turbulência, modelos de transporte radiativo, incluindo interacção da radiação com a turbulência.

Até à década de 70, os modelos utilizados eram muito simplificados em relação aos actuais, normalmente abordando os fenómenos no interior de uma câmara de combustão de forma global. No método das zonas de [Hottel e Cohen, 1958], o domínio é dividido em subdomínios com propriedades uniformes, em cada uma das quais é efectuado um balanço energético. O sistema de equações algébricas resultantes pode ser resolvido por métodos iterativos. O balanço térmico é geralmente preciso, havendo no entanto grandes erros no cálculo das temperaturas das zonas.

[Patankar e Spalding, 1973] introduziram o algoritmo *SIMPLE* no cálculo do escoamento em fornalhas tridimensionais. A viscosidade turbulenta é calculada por uma

expressão algébrica empírica e a reacção química é modelada por uma reacção global infinitamente rápida.

[Abou-Ellail *et al.*, 1977] efectuaram a simulação de uma câmara de combustão cilíndrica com escoamento gasoso turbulento, usando o modelo de turbulência $k - \varepsilon$. A reacção química é suposta global e instantânea. As grandezas escalares dependem linearmente da fracção de mistura, sendo os seus valores médios calculados com utilização de uma função densidade de probabilidade presumida cujos parâmetros são determinados pelos valores de \tilde{Z} e $\widetilde{Z''^2}$ calculados por equações de transporte. As previsões dos campos de temperatura, velocidade e fracção mássica de CO_2 apresentam formas semelhantes às obtidas experimentalmente.

[Hutchinson *et al.*, 1977] simularam fornalhas bidimensionais com *swirl*, introduziram um modelo para as correlações das flutuações da densidade e usaram como função densidade de probabilidade uma gaussiana truncada. Um modelo de fluxos foi usado para o transporte radiativo, tendo a formação de NO térmico sido calculada usando o mecanismo de Zeldovich.

[Gosman *et al.*, 1980] simularam uma fornalha industrial de produção de vidro. [Carvalho *et al.*, 1988] efectuaram a simulação tridimensional de uma fornalha de fusão de vidro com interacção entre os escoamentos gasoso e líquido. O cálculo da formação de NO foi efectuado introduzindo as reacções químicas inversas no mecanismo de Zeldovich.

A combustão de sólidos pulverizados como o carvão introduz fenómenos relacionados com o escoamento com duas fases e a gasificação de sólidos. Entre outros estudos, a modelação da combustão de carvão é feita por exemplo em [Smoot e Smith, 1985].

A utilização de malhas curvilíneas não ortogonais permite tratar geometrias complexas de um modo mais rigoroso. Usando este tipo de malhas, [Wittig *et al.*, 1988] efectuaram a simulação do escoamento na câmara de combustão duma turbina a gás.

O modelo $k - \varepsilon$ de turbulência é habitualmente considerado pouco preciso no cálculo de escoamentos com *swirl*. O modelo de turbulência das tensões de Reynolds foi utilizado por [Lin e Leschziner, 1989] no cálculo da combustão turbulenta com *swirl*, com previsões de boa qualidade em simulações bidimensionais e mais fracas nas tridimensionais.

Em unidades de combustão em que as escalas geométricas a descrever sejam muito diferentes, a decomposição do domínio de cálculo em zonas com malhas com refinamentos diferentes, como efectuado por [Coelho e Carvalho, 1993], pode tornar viável a simulação

da combustão em sistemas de grandes dimensões com um grau de precisão elevado.

A combustão em câmaras de turbinas a gás tem sido investigada activamente nas últimas décadas utilizando diversos modelos. Na simulação da combustão numa turbina a gás, [Menon *et al.*, 2000] utilizou mecanismos detalhados de reacção química e o modelo de turbulência *LES* ("Large Eddy Simulations", por exemplo [Leonard, 1974]).

A câmara de combustão, com escoamento turbulento de gás natural e ar com rotação, estudada no presente trabalho, foi objecto de um estudo experimental detalhado efectuado por [Kaufman *et al.*, 1994]. O conjunto de dados de velocidade, temperatura e concentrações são em número elevado e têm sido considerados de boa qualidade, sendo utilizados como dados de referência para validação de simulações numéricas. Estes dados experimentais serão usados para comparação com as simulações efectuadas neste trabalho.

Esta mesma câmara foi estudada numericamente em vários trabalhos em que se incluem os de [Jessee e Fiveland, 1995], [Fiveland *et al.*, 1996], [Pember *et al.*, 1996], [Jessee *et al.*, 1997], [Kaufman *et al.*, 1997], [Coelho, 1999], [Silva e Coelho, 2002].

[Jessee e Fiveland, 1995] usaram um mecanismo químico composto por duas equações, sendo as taxas de reacção dependentes da taxa de mistura, de acordo com o modelo *EDM* ou calculadas por uma expressão do tipo da equação (2.8), conforme as escalas de tempo de mistura turbulenta e de reacção química. O modelo de radiação usado foi o das ordenadas discretas. As equações de transporte foram resolvidas em malhas não ortogonais, bidimensionais e tridimensionais, usando o modelo de turbulência $k - \varepsilon$.

[Pember *et al.*, 1996] resolvem as equações de transporte não estacionárias das componentes da velocidade, entalpia e fracções mássicas com um mecanismo reduzido de reacção química. Utilizam o modelo de turbulência $k - \varepsilon$, o modelo *EDM* para a interacção entre combustão e turbulência e o modelo de radiação das ordenadas discretas. O cálculo da pressão é efectuado por resolução da equação de conservação da massa, que é igualmente utilizada para a correcção da velocidade.

[Jessee *et al.*, 1997] aplicaram basicamente os mesmos modelos usados em [Jessee e Fiveland, 1995], com utilização de mecanismos de reacção química detalhados e reduzidos.

[Coelho, 1999] usa como modelos de reacção quer o equilíbrio químico quer *EDM*, o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ e o método das ordenadas discretas. As equações de transporte são resolvidas numa malha cartesiana bidimensional.

1.5 Conteúdo da tese

A presente tese inclui essencialmente a apresentação das equações que descrevem os escoamentos de fluidos, desenvolvimentos destinados à descrição de escoamentos turbulentos com reacção química e trocas radiativas, a apresentação de métodos numéricos que permitem a simulação detalhada de escoamentos turbulentos, e a apresentação de resultados de simulações de escoamentos laminares e turbulentos, reactivos e não reactivos, comparando os resultados com dados publicados.

As equações de transporte instantâneas, que se baseiam em leis físicas fundamentais e que servem de ponto de partida para a obtenção de um modelo matemático resolúvel, são apresentadas no capítulo 2. Na secção 2.6 são apresentadas as correspondentes equações de transporte das variáveis médias, destinadas à aplicação em regime turbulento, sem inclusão de qualquer modelo de turbulência, radiação ou reacção química. São também apresentadas relações que possibilitam o cálculo das propriedades do fluido.

A simulação da combustão turbulenta gasosa, efectuada por intermédio da solução das equações algébricas de transporte de variáveis médias, requer o uso de modelos de turbulência, de reacção química, de radiação e de interacção entre a turbulência e as reacções químicas. No capítulo 3 são apresentados os modelos utilizados para o fecho do sistema de equações de transporte. O modelo das *flamelets*, usado na representação da interacção entre a turbulência e as reacções químicas, é introduzido neste mesmo capítulo. A composição química média calculada com utilização do modelo das *flamelets* faz uso de funções densidade de probabilidade, incluídas neste capítulo. Os modelos de reacção química e de radiação são também descritos no capítulo 3.

O conjunto de equações diferenciais que descrevem o comportamento físico e químico em termos de variáveis médias não pode ser resolvido por métodos analíticos. No capítulo 4 é apresentada uma forma de transformar as equações diferenciais em equações algébricas aproximadas num espaço dividido em volumes de controlo. Em cada volume de controlo as equações diferenciais são integradas, conduzindo a equações algébricas aproximadas. O método usado para a solução do conjunto de equações algébricas é igualmente apresentado neste capítulo. O conjunto de equações algébricas e o método para a sua solução constituem o modelo matemático da combustão turbulenta na câmara em estudo. A resolução das equações do modelo matemático determina os valores de um conjunto de

variáveis cujos valores não eram à partida (pelo menos em parte) conhecidos. Os campos das concentrações das espécies químicas, da temperatura, pressão, componentes da velocidade, que à partida apenas são conhecidas em certas fronteiras, podem ser determinadas num conjunto de pontos escolhidos do espaço onde ocorre o escoamento do fluido com combustão.

No capítulo 5, o modelo matemático é testado efectuando simulações de escoamentos laminares e turbulentos sem reacção química, com características diversas, e efectuando comparações com soluções numéricas padrão e com resultados experimentais.

No capítulo 6 apresentam-se alguns detalhes relacionados com a simulação numérica duma câmara de combustão particular e são apresentados os resultados da simulação. Estes resultados são comparados com outros experimentais e numéricos publicados.

No capítulo 7, retiram-se conclusões sobre os resultados obtidos e são apresentadas sugestões para trabalho futuro.

Capítulo 2

Equações de transporte

Os parâmetros de interesse nas aplicações envolvendo combustão turbulenta gasosa, como sejam dimensões da chama, temperaturas, fluxos térmicos e emissão de poluentes, podem frequentemente ser determinados experimentalmente durante o processo de combustão. No entanto, se for necessária a previsão destes parâmetros, será necessário conhecer um grande número de variáveis, como sejam a velocidade, pressão, temperatura e composição química, num domínio espacial que pode incluir toda a chama e sua vizinhança.

Para possibilitar o cálculo destas grandezas recorre-se geralmente ao balanço da acumulação, transporte e criação dessas grandezas (ou outras relacionadas) no escoamento, de que resultam equações diferenciais. Algumas propriedades do fluido, como a massa volúmica, a condutividade térmica e o calor específico, podem ser calculadas por equações algébricas a partir da temperatura, pressão e fracções mássicas das espécies químicas, obtidas estas por solução das equações de transporte.

Para uma variável escalar genérica ϕ , o balanço da variação local, transportes convectivo e difusivo e geração conduz à equação

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \phi}{\partial y_i} = \frac{\partial j_{\phi,i}}{\partial y_i} + s_{\phi} , \quad (2.1)$$

em que se usou a convenção da soma dos índices repetidos. u_i é a componente cartesiana da velocidade do fluido na direcção y_i , ρ é a massa volúmica da mistura, \vec{j}_{ϕ} o vector do fluxo difusivo de ϕ e s_{ϕ} é a taxa de geração/destruição de $\rho \phi$. O termo fonte apresenta formas diversas conforme a variável concreta em causa e os modelos físicos ou químicos

adoptados.

2.1 Equação de transporte da fracção mássica

A fracção mássica Y_k de uma espécie química k é a razão entre a massa dessa espécie química e a massa da mistura no elemento de volume considerado. No balanço da fracção mássica de uma espécie química num determinado elemento de volume estão envolvidos termos de acumulação, transporte por difusão, transporte por convecção e um termo de geração ou aniquilação por reacção química. Resulta uma equação diferencial da forma (v. p. ex. [Kuo, 1986]):

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial y_i} + \frac{\partial \rho V_{k,i} Y_k}{\partial y_i} = \dot{\rho}_k^g, \quad (2.2)$$

em que $\dot{\rho}_k^g$ é a taxa de geração de $\rho_k (\equiv \rho Y_k)$ por reacção química e $V_{k,i}$ é a componente segundo y_i da velocidade de difusão da espécie k em relação à mistura. Esta velocidade é definida como a diferença entre a velocidade média da espécie k e a velocidade média do fluido. As velocidades médias referidas são médias das velocidades das partículas ponderadas pelas massas das partículas.

Numa reacção química, o desaparecimento de certas espécies químicas corresponde exactamente ao aparecimento de outras espécies com igual massa total, pelo que

$$\sum_k \dot{\rho}_k^g = 0. \quad (2.3)$$

As velocidades de difusão \vec{V}_k dependem de forças mássicas (do campo gravítico, por exemplo) e dos gradientes de pressão, temperatura e concentrações. No estudo do transporte de espécies químicas aplicado ao caso presente, podem desprezar-se alguns dos fenómenos que produzem difusões diferenciais entre diferentes espécies, como sejam os efeitos das forças mássicas, da difusão térmica e dos gradientes de pressão.

As velocidades de difusão \vec{V}_k não são facilmente determináveis. O fluxo difusivo de massa de uma espécie k pode geralmente ser considerado como proporcional ao gradiente da fracção mássica (lei de Fick):

$$\rho Y_k V_{k,i} = -\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial y_i}, \quad (2.4)$$

em que D_k é o coeficiente de difusão da espécie k na mistura fluida.

Daqui resulta a equação de transporte da fracção mássica

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial y_i} - \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial y_i} \right) = \dot{\rho}_k^g . \quad (2.5)$$

A massa volúmica ρ pode ser calculada pela equação dos gases perfeitos de uma mistura gasosa,

$$\rho = \frac{p}{RT} \cdot \frac{1}{\sum_k Y_k / M_k} \quad (2.6)$$

em que R é a constante dos gases perfeitos, p a pressão, T a temperatura absoluta e M_k a massa molar da espécie k .

2.1.1 Cinética química

Nos escoamentos reactivos, o termo $\dot{\rho}_k^g$ depende das taxas a que decorrem as reacções químicas em cada posição da mistura gasosa. Consideremos um conjunto de K espécies químicas reagindo entre si em N reacções químicas do tipo



em que, na n - ésima reacção, as espécies E_k reagem nas proporções indicadas pelos coeficientes estequiométricos ν_{kn} , dando origem às espécies E_k nas proporções indicadas pelos coeficientes ν'_{kn} , ocorrendo também as reacções inversas.

A taxa de produção da espécie k , devida à n - ésima reacção química, pode ser determinada a partir das concentrações molares das K espécies químicas através de

$$\dot{C}_k = (\nu'_{kn} - \nu_{kn}) \cdot k_{d_n} \cdot \prod_{l=1}^K (C_l)^{\nu_{ln}} + (\nu_{kn} - \nu'_{kn}) \cdot k_{i_n} \cdot \prod_{l=1}^K (C_l)^{\nu'_{ln}} . \quad (2.8)$$

k_{d_n} e k_{i_n} são constantes das taxas de reacção directa e inversa na n -ésima reacção. A concentração molar C_l pode ser convertida na fracção mássica por intermédio de

$$Y_l = M_l \frac{C_l}{\rho} . \quad (2.9)$$

As constantes k_{d_n} e k_{i_n} exprimem-se em geral numa forma generalizada da expressão de [Arrhenius, 1889]:

$$k_n = B_n \cdot T^{\alpha_n} \exp \left(-\frac{E_{a,n}}{RT} \right) , \quad (2.10)$$

em que B_n , α_n e $E_{a,n}$ são constantes características de cada reacção.

2.2 Equação de conservação da massa

O resultado da soma para todas as espécies químicas dos termos $\vec{V}_k Y_k$ da terceira parcela da equação (2.2) é igual a zero. A forma da equação (2.2), em conjunto com a equação (2.3), garante então que a soma para todas as espécies químicas conduz à equação:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial y_i} = 0 . \quad (2.11)$$

Esta equação pode também ser obtida directamente a partir do princípio de conservação da massa.

2.3 Equação de conservação da fracção de mistura

Num escoamento em que não ocorram reacções nucleares, a massa de qualquer elemento químico é estritamente conservada, o que implica que, na equação de transporte da fracção mássica do elemento, o termo fonte é nulo. Qualquer combinação linear destas equações de transporte resulta também numa equação sem termo fonte. A variável dependente duma equação deste tipo designa-se escalar conservado.

No caso particular de um escoamento com uma alimentação de combustível e outra de oxidante, sendo ϕ uma grandeza estritamente conservada, podemos proceder a uma transformação linear de ϕ normalizada pela diferença dos seus valores entre as admissões da mistura combustível e da mistura oxidante:

$$Z = \frac{\phi - \phi_0}{\phi_1 - \phi_0} , \quad (2.12)$$

em que os índices 0 e 1 se referem respectivamente às admissões de oxidante e combustível. A nova variável Z assim definida designa-se por fracção de mistura.

A sua utilidade resulta de, em muitos casos, ser possível de forma simples determinar os valores de outras variáveis a partir do valor da fracção de mistura. A sua equação de transporte é

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Z}{\partial y_i} - \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial y_i} \right) = 0 . \quad (2.13)$$

Para que uma variável estritamente conservada ϕ possa obter-se da solução da equação (2.13) por intermédio da equação (2.12), é necessário que as condições impostas a

ϕ nas fronteiras se possam transformar, por intermédio da equação (2.12), nas condições de fronteira de Z utilizadas para a resolução da equação (2.13). Por exemplo, em paredes sólidas, a condição de impermeabilidade para as fracções mássicas produzirá, se transformada em Z , a mesma condição que a adiabaticidade para a entalpia, caso h seja uma variável estritamente conservada. Ou seja, neste caso, tanto $\frac{\partial Y_k}{\partial n} = 0$ como $\frac{\partial h}{\partial n} = 0$ implicam $\frac{\partial Z}{\partial n} = 0$, em que n é a variável de espaço perpendicular à parede.

2.4 Equação de conservação do momento linear

A conservação do momento linear conduz a uma equação

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial y_j} = F_i - \frac{\partial p}{\partial y_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial y_j}, \quad (2.14)$$

F_i é a componente da força volúmica na direcção y_i , p é a pressão e τ_{ji} é o tensor das tensões. A soma $\partial \tau_{ji} / \partial y_j$ representa a componente i da força viscosa por unidade de volume. Admitindo um fluido newtoniano, isto é, relações lineares entre as tensões e as taxas de deformação, este tensor depende das componentes da velocidade de acordo com a expressão ([Schlichting, 1979])

$$\tau_{ji} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j}{\partial y_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial y_k} \right), \quad (2.15)$$

em que μ é a viscosidade dinâmica.

A equação de conservação do momento linear na direcção y_i toma assim a forma de uma equação de transporte da componente da velocidade u_i . Caso ρ e μ não variem significativamente, esta equação pode tomar formas aproximadas mais simples, como

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial y_j} = F_i - \frac{\partial p}{\partial y_i} + \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial y_j} \right). \quad (2.16)$$

2.5 Equação de conservação da energia

A conservação da energia pode tomar a forma genérica da equação (2.1). Em vez de usarmos como variável dependente a energia, é por vezes mais conveniente usar a entalpia específica,

$$h = e + \frac{p}{\rho}, \quad (2.17)$$

que por sua vez se exprime em termos das entalpias específicas das espécies na forma

$$h = \sum_k h_k Y_k. \quad (2.18)$$

A entalpia da espécie k , h_k , está relacionada com a entalpia de formação $\Delta h_{f,k}^0$ à temperatura T^0 e com o acréscimo de energia sensível entre esta temperatura e T :

$$h_k = \Delta h_{f,k}^0 + \int_{T^0}^T c_{p,k} dT, \quad (2.19)$$

em que $c_{p,k}$ é o calor específico a pressão constante da espécie k . Usando a entalpia específica como variável dependente, resulta uma equação de transporte da forma

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h}{\partial y_i} = \frac{\partial j_{h,i}}{\partial y_i} + s_h. \quad (2.20)$$

A entalpia específica será designada apenas por entalpia. O fluxo difusivo de entalpia pode ser modelado, de acordo com a lei de Fourier, proporcionalmente ao gradiente de h . Considerando também os fluxos de entalpia devidos à difusão de espécies, surge um termo dependente dos gradientes da composição química. Este termo é desprezável quando se puder considerar $Le_k = Sc_k/Pr = 1$. Pr é o número de Prandtl e Sc_k o número de Schmidt da espécie k :

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad ; \quad Sc_k = \frac{\nu}{D_k}, \quad (2.21)$$

em que ν é a viscosidade cinemática e α a difusividade térmica.

Para o escoamento de uma mistura de espécies químicas a baixa velocidade, podemos desprezar os fluxos de energia cinética, as derivadas da pressão e a dissipação viscosa. Nestas condições, a equação de transporte da entalpia pode tomar a forma ([Libby e Williams, 1994])

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h}{\partial y_i} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left[\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial y_i} + \mu \sum_k \left(\frac{1}{Sc_k} - \frac{1}{Pr} \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial y_i} \right] + s_{rad}. \quad (2.22)$$

Como termo fonte retemos apenas o termo da potência radiativa volúmica, s_{rad} .

2.6 As equações de escoamentos reactivos em regime turbulento

As equações de transporte de meios contínuos apresentadas neste capítulo constituem uma descrição completa dum escoamento reactivo, desde que se especifiquem as condições iniciais e de fronteira, assim como os valores de parâmetros que não foram incluídos no conjunto de variáveis dependentes do sistema de equações. Alguns destes parâmetros são as taxas de criação de massa de espécies químicas, a massa volúmica, coeficientes de difusão, propriedades como entalpias de formação e valores de termos fonte.

Esta descrição completa não é no entanto passível de resolução analítica, na quase totalidade de escoamentos reactivos com interesse prático. Este facto motiva o desenvolvimento de métodos de transformação do sistema de equações diferenciais de transporte em equações algébricas resolúveis por métodos numéricos.

A simulação de escoamentos reactivos turbulentos pela resolução das equações algébricas deduzidas das equações de transporte instantâneas não é possível na prática por limitações computacionais, excepto em casos muito simples. Os meios computacionais actuais e do futuro previsível não resolvem em tempo útil os sistemas de equações que apresentam escalas de tempo e espaço tão díspares como os fenómenos reactivos e de escoamento que descrevem.

As equações de transporte instantâneas das secções anteriores podem no entanto ser transformadas em equações de transporte das variáveis médias, cuja solução é viável. Uma das formas de obter equações das variáveis médias consiste na decomposição das variáveis dependentes em duas parcelas: um termo médio da variável e um desvio em relação à média.

As decomposições habitualmente utilizadas para a variável genérica ϕ são a decomposição de Reynolds,

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.23)$$

e a decomposição de Favre ([Favre, 1965]),

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad , \quad (2.24)$$

em que os valores médios se definem por

$$\bar{\phi} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \phi dt}{\Delta t} \quad (2.25)$$

e

$$\tilde{\phi} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \rho \phi dt}{\bar{\rho} \Delta t} . \quad (2.26)$$

Destas definições decorre que

$$\overline{\phi'} = 0 \quad \text{e} \quad \overline{\rho \phi''} = \bar{\rho} \tilde{\phi''} = 0 . \quad (2.27)$$

Quando as variáveis dependentes são determinadas experimentalmente, os seus valores médios dependem geralmente dos métodos experimentais utilizados ([Jones e Whitelaw, 1982]). Para muitas das variáveis, os valores experimentais são mais próximos da média de Favre do que da de Reynolds, não sendo no entanto uma regra geral. O valor médio da pressão corresponde, para grande parte dos métodos experimentais, a valores próximos da média de Reynolds. Os valores da temperatura estão mais próximos da média de Reynolds ou de Favre, conforme se utilizem métodos ópticos ou termopares, dependendo neste caso ainda das dimensões dos termopares. As fracções mássicas experimentais correspondem em geral a valores intermédios entre os dois tipos de média.

Nos escoamentos turbulentos com combustão, em que existem grandes variações de composição química e temperatura, as flutuações da massa volúmica em relação à média podem ser de grandeza comparável à dos próprios valores da massa volúmica. As grandezas cujas médias dependem fortemente da massa volúmica devem, em correspondência com a realidade experimental, constar nas equações de transporte como médias de Favre.

Além disso, as equações médias deduzidas a partir das equações instantâneas apresentam um menor número de termos quando se usa a média de Favre do que usando a média convencional. As equações médias são geralmente de mais fácil interpretação e modelação quando se usa a média de Favre ([Warnatz *et al.*, 1996]).

Por estes motivos, grande número de estudos e cálculos numéricos usam a média de Favre para análise e solução das equações médias dos modelos de turbulência, sendo igualmente adoptada no presente trabalho.

Efectuando uma decomposição de Favre, a aplicação da média à equação de

transporte da variável genérica ϕ , equação (2.1), resulta numa equação do tipo

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\phi}}{\partial y_i} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\overline{j_{\phi,i}} - \overline{\rho u_i'' \phi''} \right) + \overline{s_\phi} . \quad (2.28)$$

A aplicação da operação de média aos termos decompostos da equação (2.5) resulta na seguinte equação de transporte da fracção mássica média da espécie k :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial y_i} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\overline{\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial y_i}} - \overline{\rho u_i'' Y_k''} \right) + \overline{\dot{\rho}_k^g} . \quad (2.29)$$

O termo $\overline{\rho u_i'' Y_k''}$ deverá ser determinado por uma equação do seu transporte ou por aproximações algébricas, dependendo do modelo de turbulência usado.

Mantendo uma decomposição de Reynolds para a massa volúmica, a equação de conservação da massa em regime turbulento, usando a decomposição de Favre para as velocidades é:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial y_i} = 0 . \quad (2.30)$$

A equação da fracção de mistura, com aproximações do tipo das efectuadas para as fracções mássicas, resulta na equação de transporte da fracção de mistura média:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z}}{\partial y_i} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\overline{\rho D_Z \frac{\partial Z}{\partial y_i}} - \overline{\rho u_i'' Z''} \right) . \quad (2.31)$$

Tomando como base a equação (2.14), efectuando a decomposição de Favre das velocidades e aplicando a média temporal aos termos da equação, obtém-se a seguinte equação de transporte da velocidade média \tilde{u}_i :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial y_j} = \overline{F_i} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial y_i} + \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\overline{\tau_{ji}} - \overline{\rho u_j'' u_i''} \right) . \quad (2.32)$$

Na modelação das difusões de massa e energia que utilizaremos, os números de Prandtl e Schmidt são iguais. A aplicação da média aos termos da equação (2.22) conduz nestas condições à equação de transporte da entalpia média

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}}{\partial y_i} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial y_i} - \overline{\rho u_i'' h''} \right) + \overline{s_{rad}} . \quad (2.33)$$

As correlações entre os desvios às médias devem ser calculadas por equações de transporte próprias com posterior modelação algébrica ou por intermédio duma modelação algébrica directa. Consegue-se assim fechar o sistema de equações do escoamento

turbulento, o que significa obter um sistema de equações em que haja igual número de variáveis dependentes desconhecidas e de equações. O fecho deste sistema de equações será abordado no capítulo 3.

Capítulo 3

Modelos físicos de turbulência, combustão e radiação

O fecho do sistema de equações de transporte instantâneas apresentadas no capítulo anterior envolve apenas a determinação adicional de parâmetros cujas expressões algébricas são geralmente conhecidas. Ao contrário, as equações 2.28-2.33 de transporte das variáveis médias incluem correlações como $\overline{\rho u_i'' \phi''}$, para as quais não existem normalmente expressões que permitam determiná-las a partir de quantidades conhecidas. Estes termos podem ser determinados por expressões algébricas empíricas e/ou pela solução de equações de transporte em que constem como variáveis dependentes. Neste caso, o fecho destas equações estará dependente de novas correlações de valor desconhecido. Este processo tornar-se-ia recorrente. É necessária em certa altura do processo a escolha de valores, expressões algébricas ou equações de transporte modeladas, para a determinação das correlações resultantes da obtenção de valores médios de grandezas decompostas. A forma escolhida para obter o fecho do sistema de equações define o que se designa por modelo de turbulência.

Nas equações de transporte das fracções mássicas e da energia médias em regime turbulento com combustão, o termo fonte apresenta fortes desvios em relação à linearidade com a temperatura e as fracções mássicas. Este facto conduz a dificuldades no seu cálculo, pelo que se torna necessário o recurso a modelos de combustão que permitem determinar os valores desses termos fonte em regime turbulento na presença de combustão. O modelo

de *flamelets* adoptado permite, sob certas condições, a determinação dos valores médios das fracções mássicas sem ter de resolver directamente as equações (2.29).

O campo de temperaturas é determinado a partir da solução da equação de transporte da entalpia média. As trocas radiativas presentes no termo fonte da equação de transporte da entalpia, embora tendo em geral expressões conhecidas, conduzem a cálculos demorados pelo facto de terem variação com T^4 e de cada elemento de fluido efectuar geralmente trocas radiativas com todos os outros elementos de fluido e paredes. Por isso se utilizam também modelos de radiação simplificados para cálculo do termo fonte na equação da entalpia.

3.1 Modelo de turbulência

Por considerações de analogia entre o transporte de momento linear nos regimes laminar e turbulento, [Boussinesq, 1877] apresentou a hipótese da proporcionalidade entre a tensão de Reynolds $-\overline{\rho u'v'}$ e o gradiente da velocidade média

$$-\overline{\rho u'v'} = \mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial y}, \quad (3.1)$$

em que o parâmetro μ_t se designa actualmente por coeficiente de viscosidade turbulenta. Na sua hipótese da comprimento de mistura, [Prandtl, 1925] propôs para o coeficiente de proporcionalidade a expressão

$$\mu_t = \bar{\rho} l^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right|, \quad (3.2)$$

em que o parâmetro empírico l depende do escoamento em consideração.

Por não ser necessária a solução de nova equação de transporte, este modelo é classificado como sendo de zero equações.

O modelo de uma equação de Prandtl ([Prandtl, 1945]) resolve uma equação de transporte da energia cinética turbulenta e modela a viscosidade turbulenta por intermédio de

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu l \sqrt{k}, \quad (3.3)$$

em que C_μ e l são parâmetros empíricos e k é a energia cinética turbulenta (por unidade de massa).

Alguns dos modelos mais utilizados actualmente são modelos de duas equações, como o modelo $k - \varepsilon$ apresentado na próxima subsecção.

O modelo das tensões de Reynolds de [Hanjalic e Launder, 1972], resolve as equações de transporte das tensões $\widetilde{\rho u_i'' u_j''}$, e não necessita em princípio de calcular a viscosidade turbulenta. As equações de transporte das tensões de Reynolds têm por sua vez de ser fechadas por intermédio da determinação dos valores das correlações triplas. A difusão turbulenta do momento linear calculada por este modelo não é isotrópica, ao contrário do que sucede no modelo $k - \varepsilon$ clássico. O modelo das tensões de Reynolds vem sendo cada vez mais utilizado e parece constituir uma boa opção no futuro próximo entre precisão e economia. No entanto, como referem [Hwang e Jaw, 1998] num artigo de revisão e comparação de modelos de turbulência, os resultados obtidos não são em certos casos significativamente superiores aos obtidos com modelos $k - \varepsilon$.

No modelo algébrico das tensões de Reynolds ([Rodi, 1972]), os termos diferenciais das equações de transporte de $\widetilde{\rho u_i'' u_j''}$ são modelados por expressões algébricas, tornando esta versão algébrica muito mais económica do que a original versão diferencial.

O cálculo do escoamento resolvendo as equações de transporte das variáveis instantâneas em escalas espaciais e temporais desde as escalas integrais até às escalas de Kolmogorov é designado por simulação numérica directa. Actualmente só pode ser efectuado em casos muito simples devido à necessidade de utilização de malhas muito densas. Na medida em que neste método não se calculam de forma semi-empírica quaisquer termos de correlação, a simulação numérica directa não é um modelo de turbulência considerado como método de fecho semi-empírico do sistema de equações de transporte.

Em alternativa à simulação numérica directa, o modelo designado por *LES* ("Large Eddy Simulations", por exemplo [Leonard, 1974]) simula directamente as escalas maiores e usa modelos de turbulência para as menores escalas espaciais.

Referências a outros modelos de turbulência podem ser encontradas em [Piquet, 1999].

3.1.1 Modelo de turbulência $k - \varepsilon$

Uma hipótese análoga à que Boussinesq utilizou originalmente (equação 3.1) para os fluxos turbulentos do momento linear permite exprimir os fluxos turbulentos proporcionalmente ao gradiente da variável genérica $\tilde{\phi}$:

$$-\overline{\rho u_i'' \phi''} = \frac{\mu_t}{Pr_\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial y_i}. \quad (3.4)$$

No caso particular das tensões de Reynolds, a hipótese de Boussinesq pode ser expressa por:

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = 2\mu_t \widetilde{S_{ij}} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial y_k} + \rho k \right) = \mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial y_j} + \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial y_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial y_k} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} \rho k \quad (3.5)$$

em que

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j}{\partial y_i} \right) . \quad (3.6)$$

A equação (2.28) passa assim a depender de grandezas para as quais são resolvidas equações de transporte e da quantidade desconhecida μ_t , viscosidade dinâmica turbulenta, que deverá ser determinada por qualquer outro método.

Utilizando análise dimensional, e baseando-se em expressões de μ_t dependentes de parâmetros geométricos empíricos, [Hanjalic, 1970] propôs a expressão

$$\mu_t = C_\mu \rho k^2 / \varepsilon , \quad (3.7)$$

em que C_μ é uma constante do modelo que pode ser determinada experimentalmente e ε é a taxa de dissipação de k :

$$k = \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''} \quad ; \quad \varepsilon = 2\nu \widetilde{S_{ij}'' S_{ij}''} \quad (3.8)$$

em que

$$S_{ij}'' = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i''}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial y_i} \right) . \quad (3.9)$$

As variáveis k e ε são determinadas com base em equações de transporte.

Com base nas equações (instantânea e média) de transporte do momento linear, é possível obter uma equação para o transporte da energia cinética turbulenta ([Hanjalic, 1970]; [Jones e Whitelaw, 1982]). Desprezando os termos contendo o gradiente de pressão, resulta ([Kuo, 1986])

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_i k}}{\partial y_i} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y_i} \right] - \widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial y_j} - \bar{\rho} \varepsilon . \quad (3.10)$$

A segunda parcela do segundo membro, termo de geração de energia cinética turbulenta, pode igualmente ser modelada com base na hipótese de Boussinesq.

A equação de transporte de ε contém um conjunto de termos de difícil modelação ([Lockwood e Naguib, 1975]). As equações de transporte de ε que se costumam utilizar

são então obtidas com base na dedução exacta da equação de ε , eliminando alguns termos de ordem de grandeza inferior e mantendo outros, eventualmente modificados para melhor concordância com dados experimentais:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon}{\partial y_i} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y_i} \right] - C_1 \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{\bar{\rho} u_i u_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial y_j} - C_2 \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (3.11)$$

Os valores atribuídos aos parâmetros C_μ , Pr_k , Pr_ε , C_1 , C_2 , variam conforme os autores e os casos em estudo, sendo no entanto habitualmente pequena a dispersão de valores atribuídos.

Neste modelo $k - \varepsilon$ de turbulência, os valores de k e ε são calculados pelas respectivas equações de transporte, permitindo o cálculo da viscosidade turbulenta μ_t por intermédio da equação (3.7). Nas equações médias de transporte, o transporte turbulento é modelado de forma análoga à da equação (3.4), de acordo com a hipótese de Boussinesq.

Este é um modelo de turbulência de duas equações e servirá como base às simulações dos escoamentos apresentadas. A sua aplicação a escoamentos em que o número de Reynolds é baixo conduz normalmente a resultados pouco realistas, devendo nesse caso ser substituído por modelos modificados para baixos números de Reynolds (por exemplo [Durbin, 1995]).

O método do grupo de renormalização pode ser aplicado à turbulência ([Yakhot e Orszag, 1986], [Smith e Reynolds, 1992]). A dedução das equações de transporte da energia cinética turbulenta e da sua taxa de dissipação usando o método do grupo de renormalização implica novos valores para as constantes presentes nas equações (ver tabela 3.1). No modelo $k - \varepsilon$ de turbulência esta alteração é incorporada num novo valor da constante C_μ .

No modelo de turbulência $k - \varepsilon$ com utilização dos resultados do grupo de renormalização ($k - \varepsilon - RNG$), a equação de k mantém-se e na equação de ε é incluída uma parcela habitualmente desprezada no modelo $k - \varepsilon$ clássico. Mantendo a média de Reynolds, utilizada habitualmente nas deduções baseadas no RNG , este termo tem a seguinte forma:

$$R = 2\nu \overline{S_{ij}} \frac{\partial u_i}{\partial y_i} \frac{\partial u_i}{\partial y_j} \quad (3.12)$$

Modelando a segunda parcela do segundo membro da equação (3.11) pela hipótese

de Boussinesq obtém-se a seguinte equação de transporte de ε :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon}{\partial y_i} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y_i} \right] - C_1 \frac{\varepsilon}{k} \mu_t S^2 - C_2 \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} - \bar{\rho} C_\mu \frac{\varepsilon^2}{k} \frac{\eta^3 (1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta \eta^3}. \quad (3.13)$$

A última parcela resulta da modelação ([Yakhot e Smith, 1992]) do termo R que habitualmente se despreza no modelo clássico de turbulência $k-\varepsilon$, e onde constam os seguintes parâmetros:

$$\eta = \frac{k \left(2 \widetilde{S_{ij}} \widetilde{S_{ij}} \right)^{1/2}}{\varepsilon} \quad ; \quad \beta = 0.012 \quad ; \quad \eta_0 = 4.38$$

Conforme se utilize a versão clássica ou a versão *RNG* do modelo de turbulência $k - \varepsilon$, aos parâmetros utilizados são atribuídos os valores apresentados na tabela 3.1.

modelos \ parâmetros	C_1	C_2	C_μ	Pr_k	Pr_ε
$k - \varepsilon$	1.44	1.92	0.09	1	1.3
$k - \varepsilon - RNG$	1.42	1.68	0.0837	0.719	0.719

Tabela 3.1 Valores dos parâmetros usados nos modelos de turbulência $k - \varepsilon$ e $k - \varepsilon - RNG$.

3.2 Modelo de combustão

As reacções químicas da combustão, genericamente representadas pela equação (2.7), produzem alterações na composição química em cada ponto, a taxas dadas pela equação (2.8). A evolução da composição química poderia em princípio ser determinada resolvendo as equações de transporte (2.29) com a modelação do fluxo turbulento por intermédio por exemplo duma equação do tipo da (3.4). No entanto, os cálculos numéricos decorrentes dessas equações só em casos muito simples podem, com os meios computacionais actuais, ser concretizados e dar resultados fiáveis.

Para a combustão dum hidrocarboneto leve como o metano, as reacções químicas envolvem geralmente várias dezenas de espécies químicas relevantes reagindo entre si em dezenas ou centenas de reacções químicas elementares. Um número mais elevado de espécies químicas implica um maior tempo de cálculo na solução do conjunto de equações (2.29). Por outro lado, os termos fonte das equações (2.5), $\dot{\rho}_k^g$, não são lineares nas fracções mássicas, e são altamente não lineares na sua dependência da temperatura, como se verifica

pela expressão de Arrhenius das constantes das taxas de reacção, equação (2.10). Daqui resultam escalas de tempo das taxas de reacção com ordens de grandeza muito diversas. Existem métodos de solução numérica de equações diferenciais que permitem resolver as equações de transporte para escoamentos laminares. Nos escoamentos turbulentos, as flutuações da temperatura são importantes, inviabilizando o cálculo das médias dos termos de Arrhenius.

Os modelos de combustão são compostos por dois submodelos, um para o mecanismo de reacção química e outro para o cálculo da composição química no escoamento turbulento. O mecanismo de reacção é constituído pelo conjunto de reacções químicas consideradas relevantes, que podem ser reacções químicas elementares, reacções químicas reduzidas ou ainda uma única reacção global, acompanhadas, cada uma das reacções, por expressões que permitam o cálculo da cinética química. Um modelo para determinar os valores médios das fracções mássicas no escoamento turbulento deverá determinar os valores médios das taxas de reacção para inclusão nas equações (2.29), ou então determinar composições químicas instantâneas e, a partir destas, determinar os seus valores médios.

No modelo utilizado neste trabalho, as fracções mássicas instantâneas serão determinadas em função dum pequeno número de escalares que são funções do escoamento e da composição química. Os valores médios das fracções mássicas são determinados a partir dos seus valores instantâneos, supondo conhecido o comportamento estatístico das variáveis escalares independentes no escoamento turbulento.

3.2.1 Mecanismo de reacção química

A descrição das reacções químicas com o máximo nível de detalhe que interessa à análise da combustão é feita por intermédio de reacções químicas elementares. O seu número depende da importância relativa das diversas reacções nas taxas de produção ou aniquilação das espécies químicas que se considerem mais importantes. Geralmente estão envolvidas dezenas de espécies químicas que intervêm num número de reacções elementares que pode ascender a centenas ou milhares. A solução de números tão elevados de equações de transporte (2.29) é um processo demorado.

O número de equações a resolver pode no entanto ser drasticamente reduzido fazendo uso de mecanismos reduzidos de reacção química. Os mecanismos reduzidos,

determinados com base em mecanismos detalhados e em observações experimentais, são compostos por um pequeno número de reacções químicas que podem ou não ser reacções elementares. Pode ainda reduzir-se o número de equações químicas a uma única reacção global em que constam apenas os reagentes e produtos de reacção preponderantes.

Sendo possível determinar as taxas médias de criação de espécies presentes nas equações químicas, $\overline{\rho_k^g}$, este procedimento torna viável a solução numérica de um pequeno número de equações do tipo (2.29).

Os métodos de redução de mecanismos químicos baseiam-se em geral em aproximações de estado estacionário ou de equilíbrio parcial. Quando uma espécie química é muito reactiva, a sua taxa de criação é aproximadamente igual à sua taxa de destruição, podendo considerar-se que a espécie em causa se encontra em regime estacionário. A aproximação de equilíbrio parcial é utilizada quando uma reacção particular tem elevadas taxas de reacção directa e inversa, de modo que os reagentes e produtos atingem as concentrações que atingiriam no caso de haver equilíbrio químico. A apresentação e utilização destes métodos podem ser encontradas por exemplo em [Peters e Kee, 1987], [Smooke, 1991], [Chen, 1997].

A descrição mais sintética do conjunto de reacções químicas que ocorrem no escoamento de fluidos consiste na sua redução a uma única reacção global envolvendo apenas as principais espécies químicas, em número de poucas unidades. A determinação da taxa de reacção global pode ser feita por expressões empíricas que relacionam a taxa de reacção com as concentrações dos reagentes e a temperatura. A adequação deste modelo de reacção às reacções que ocorrem na combustão é muitas vezes insatisfatório, quer porque não permite calcular directamente as concentrações das espécies químicas ausentes da equação química global, quer porque as variações de temperatura existentes entre vários pontos da chama torna às vezes difícil o cálculo das taxas de reacção com base na utilização dessas expressões empíricas, cuja gama de validade em termos de temperaturas e pressões é reduzida.

Devido a estas limitações, é preferível a utilização quer de modelos reduzidos de equações químicas quer de modelos detalhados, com um número de espécies e de equações arbitrário.

O modelo de combustão utilizado nesta tese permite o uso de mecanismos químicos detalhados, tendo sido adoptado um mecanismo C_1 (só se consideram compostos de car-

bono com um máximo de um átomo deste elemento por molécula). Estas espécies químicas reagem entre si em 58 reacções químicas elementares (tabela 3.2) tal como apresentado em [Bilger *et al.*, 1990].

n	reacção elementar	B_n	α_n	$E_{a,n}$	eficiência do 3º corpo
1	$\text{CH}_4 + \text{M} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H} + \text{M}$	6.3×10^{14}	0	104000	5/0/0/0/0/0/0
2	$\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HO}_2$	7.9×10^{13}	0	56000	
3	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2$	2.2×10^4	3	8750	
4	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{OH}$	1.6×10^6	2.36	7400	
5	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	1.6×10^6	2.1	2460	
6	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	6.8×10^{13}	0	0	
7	$\text{CH}_3 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	1×10^{12}	0	0	
8	$\text{CH}_3 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	1.5×10^{13}	0	5000	
9	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_2 + \text{H}_2$	9×10^{13}	0	15100	
10	$\text{CH}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH} + \text{H}_2$	1.4×10^{19}	-2	0	
11	$\text{CH}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	2.5×10^{13}	0	0	
12	$\text{CH}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH} + \text{H}_2\text{O}$	4.5×10^{13}	0	3000	
13	$\text{CH} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{O}$	3.3×10^{13}	0	0	
14	$\text{CH} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}$	5.7×10^{13}	0	0	
15	$\text{CH} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}$	$3. \times 10^{13}$	0	0	
16	$\text{CH} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{CO}$	3.4×10^{12}	0	690	
17	$\text{CH}_2 + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{CO}$	1.1×10^{11}	0	1000	
18	$\text{CH}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + 2\text{H}$	3×10^{13}	0	0	
19	$\text{CH}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$	5×10^{13}	0	0	
20	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + 2\text{H}$	1.6×10^{12}	0	1000	
21	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{O}$	5×10^{13}	0	9000	
22	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$	6.9×10^{11}	0	500	
23	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	1.9×10^{10}	0	-1000	
24	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	8.6×10^{10}	0	-500	

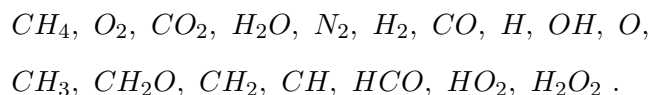
Tabela 3.2: Reacções elementares relevantes na combustão do metano e valor dos coeficientes na expressão (2.10). B_n em $(\text{mole.cm}^{-3})^{1-m} \text{s}^{-1}$ e $E_{a,n}$ em cal/mole em que m é a molecularidade da reacção. As eficiências do terceiro corpo referem-se por ordem às moléculas H_2O / H_2 / CH_4 / CO_2 / CO / O_2 / N_2 (continua).

n	reacção elementar	B_n	α_n	$E_{a,n}$	eficiência do 3º corpo
25	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{OH}$	4.3×10^{10}	0	-500	
26	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	3.43×10^9	1.18	-447	
27	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2$	2.19×10^8	1.77	3000	
28	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H} + \text{M}$	3.31×10^{16}	0	81000	6.5/0/6.5/1.5/0.75/0.4/0.4
29	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{OH}$	1.81×10^{13}	0	3082	
30	$\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	5×10^{12}	0	0	
31	$\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO} + \text{M}$	1.6×10^{14}	0	14700	6.5/0/6.5/1.5/0.75/0.4/0.4
32	$\text{HCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$	4×10^{13}	0	0	
33	$\text{HCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$	1×10^{13}	0	0	
34	$\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CO}$	3.3×10^{13}	-0.4	0	
35	$\text{CO} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{M}$	3.2×10^{13}	0	-4200	6.5/0/3/1.5/0.75/0.4/0.4
36	$\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$	1.51×10^7	1.3	-758	
37	$\text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{O}$	1.6×10^{13}	0	41000	
38	$\text{HO}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{OH}$	5.8×10^{13}	0	22934	
39	$\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$	1.7×10^{13}	0	47780	
40	$\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$	1.17×10^9	1.3	3626	
41	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	5.13×10^{16}	-0.816	16507	
42	$\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	1.8×10^{10}	1	8826	
43	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$	3.61×10^{17}	-0.72	0	18.6/2.86/0/4.2/2.11/0/1.26
44	$\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	7.5×10^{12}	0	0	
45	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$	1.4×10^{14}	0	1073	
46	$\text{O} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{OH}$	3.2×10^{13}	0	0	
47	$2\text{OH} \rightleftharpoons \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	6×10^8	1.3	0	
48	$2\text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{M}$	1×10^{18}	-1	0	6.5/0/6.5/1.5/0.75/0.4/0
49	$2\text{H} + \text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{H}_2$	9.2×10^{16}	-0.6	0	
50	$2\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$	6×10^{19}	-1.25	0	
51	$\text{H} + \text{H} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{CO}_2$	5.49×10^{20}	-2	0	
52	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	1.6×10^{22}	-2	0	5./0/0/0/0/0/0
53	$\text{H} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{M}$	6.2×10^{16}	-0.6	0	5./0/0/0/0/0/0
54	$\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	1.25×10^{13}	0	0	
55	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	2×10^{12}	0	0	
56	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons 2\text{OH} + \text{M}$	1.3×10^{17}	0	45500	6.5/0/6.5/1.5/0.75/0.4/0.4
57	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2$	1.6×10^{12}	0	3800	
58	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1×10^{13}	0	1800	

Tabela 3.2 (continuação)

A "eficiência do terceiro corpo" M é o valor pelo qual a concentração de M deve ser multiplicada na equação (2.8) da taxa de reacção.

O mecanismo químico representado na tabela 3.2 envolve 17 espécies químicas,



Os óxidos de azoto são poluentes importantes e as suas concentrações poderiam em princípio ser calculadas pelos mesmos métodos usados para o cálculo de outras espécies. A modelação detalhada da formação e destruição dos óxidos de azoto envolve centenas de reacções elementares. As suas taxas de formação são muito menores que as taxas de formação de outras espécies relevantes, variando muito com a temperatura. A inclusão destes compostos no cálculo simultâneo do escoamento turbulento e da combustão só pode ser feita utilizando modelos reduzidos ou globais de reacção química. A sua presença não altera significativamente as reacções químicas da combustão do metano. Por este motivo, o cálculo das concentrações dos óxidos de azoto é normalmente efectuado *a posteriori*, podendo neste caso utilizar modelos detalhados de reacção química ([Bowman, 1992]).

A fuligem é um poluente constituído por partículas contendo essencialmente carbono, em conjunto com um elevado número de espécies químicas em baixas concentrações. A cinética química associada à sua formação, assim como a agregação das partículas, são insuficientemente conhecidas. Ao contrário do que sucede com os óxidos de azoto, a fuligem pode nalguns casos ter uma interacção apreciável com a combustão, especialmente devido à radiação emitida. Modelos para a formação e oxidação da fuligem podem ser encontrados em [Lindstedt, 1994].

A determinação das concentrações destes poluentes não será incluída neste trabalho.

3.2.2 Cálculo da composição química

A determinação do campo de composições químicas requer geralmente a solução das equações (2.29) para todas as espécies químicas. O cálculo dos valores médios do termo de produção química nesta equação apresenta problemas relacionados com a sua não linearidade em relação à temperatura e concentrações. O cálculo destes valores médios pode geralmente efectuar-se com base em vários modelos de interacção da combustão com a turbulência. Em certos modelos de combustão a determinação das fracções mássicas

médias não se baseia no cálculo das médias dos termos de produção química. As fracções mássicas médias podem ser determinadas como a média das fracções mássicas em regime laminar, na condição de o escoamento reactivo poder ser considerado em determinado instante composto por um conjunto de estruturas laminares.

Nos casos em que todas as reacções químicas relevantes são rápidas em relação às taxas de mistura, é possível aplicar um modelo em que, numa reacção química global, o combustível e o oxidante reagem instantâneamente à medida que se processa a mistura. No modelo EBU ("Eddy Break-Up") de [Spalding, 1971b], a taxa média de consumo de combustível é expressa em termos da variância da fracção mássica de combustível e é calculada pela expressão

$$\overline{\dot{\rho}_C} = -\frac{\bar{\rho}C_C}{\bar{M}}\sqrt{\overline{Y_C^2}}\cdot\frac{\varepsilon}{k} \quad (3.14)$$

em que C_C é uma constante e \bar{M} é a massa molar média.

Um modelo em que a taxa de variação da concentração de combustível é igualmente determinada pela taxa de mistura é designado por "eddy dissipation model" e é devido a [Magnussen e Hjertager, 1976]. A taxa de reacção, além de depender da escala de tempo turbulenta k/ε , é limitada pelas fracções mássicas do combustível, oxidante e produtos da reacção.

Estes modelos foram desenvolvidos para reacções químicas globais instantâneas. Podem ser adaptados a reacções químicas detalhadas não instantâneas, tal como no modelo apresentado por [Magnussen, 1981].

Na combustão turbulenta com apenas duas alimentações de reagentes, com valores elevados do número de Damkohler (escalas de tempo das reacções químicas suficientemente inferiores às de transporte) e em que se considerem iguais os coeficientes de difusão de todas as espécies, é possível determinar os valores médios das fracções mássicas sem ter de calcular os valores médios do termo fonte químico. Um modelo com estas características é descrito na subsecção 3.2.3.

O uso de mecanismos detalhados de reacção é viável na medida em que se possa efectuar o cálculo da composição química de forma independente do cálculo do escoamento. As fracções mássicas, calculadas independentemente do escoamento, serão inseridas no cálculo do escoamento por intermédio da fracção de mistura e da taxa de dissipação escalar. Composição química e escoamento estarão acopladas por um pequeno número de parâme-

tros, em vez de estarem acoplados por um número de variáveis igual ao número de espécies químicas além de propriedades físicas da mistura.

Os cálculos do escoamento e das reacções químicas podem ser separados substituindo a descrição espacial da composição química por uma descrição em termos de uma variável estritamente conservada e calculando esta como função do espaço em conjunto com o cálculo do escoamento. O modelo das *flamelets* usa este tipo de descrição.

3.2.3 Modelo das *flamelets* laminares

As medidas experimentais das composições químicas e temperatura em chamas laminares revelaram que estas grandezas se podem exprimir numa forma quase universal como função da fracção de mistura. Para as chamas laminares em que as condições de fronteira sejam independentes do campo de velocidades e os números de Lewis, definidos como

$$Le_k = \frac{\alpha}{D_k} \quad (3.15)$$

sejam unitários para todas as espécies, os campos de escalares podem ser descritos de forma universal em função da fracção de mistura, independentemente da configuração do escoamento ([Libby e Williams, 1994]). A estrutura calculada numa chama laminar é afectada pelos valores atribuídos aos coeficientes de difusão das espécies, que têm também influência na determinação das taxas críticas de deformação que produzem extinção da chama ([Williams, 2001]). A aproximação de Le_k unitários será no entanto utilizada pela simplificação que introduz no modelo das *flamelets*.

Nos casos em que as reacções químicas se processam em escalas de tempo de ordem inferior às das escalas de tempo de transporte ($Da \gg 1$), o escoamento turbulento pode ser encarado como constituído por um conjunto de pequenas estruturas laminares, com a composição química dependendo dos valores locais da fracção de mistura. Nestas pequenas estruturas laminares processam-se reacções químicas, que são mais intensas na proximidade das superfícies estequiométricas. Estas estruturas em que as reacções químicas se processam mais rapidamente que os transportes difusivos e convectivos são designadas por *flamelets* laminares.

A dependência das variáveis escalares como função universal do escalar conservado, $\phi_k(Z)$, só é realista quando se trata de escoamentos reactivos laminares em que as

escalas de tempo das reacções químicas são muito menores que as escalas de tempo de mistura. Para um determinado valor da fracção de mistura verifica-se que a composição química e temperatura não são únicas. Estas variações estão relacionadas com a renovação da composição química por meio de transporte quando o número de Damkohler não é suficientemente elevado. A renovação por meio de transporte sendo lenta, a composição química está próxima do equilíbrio. Quando as reacções químicas não têm tempo suficiente para atingir o equilíbrio, a composição química e a temperatura não coincidem com as calculadas no pressuposto de equilíbrio químico, como mostram os dados experimentais da figura 3.1 em relação à temperatura. A composição química fora do equilíbrio requer a solução do sistema de equações (2.29) ou de outras equações que incorporem a interacção entre a composição química e o transporte de espécies.

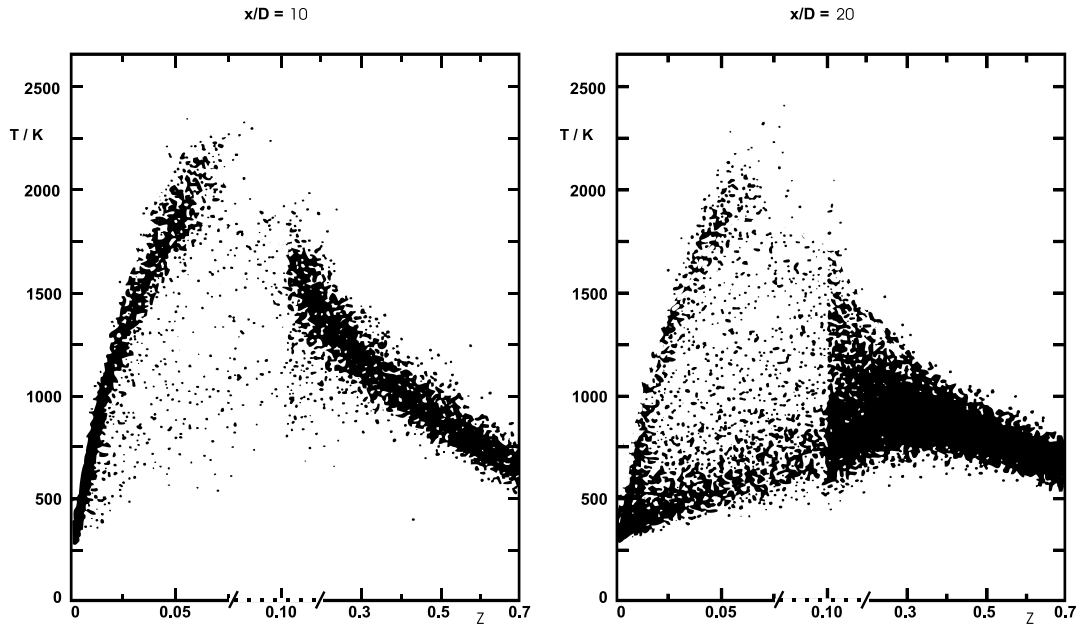


Figura 3.1: Valores simultâneos de temperatura e fracção de mistura numa chama de difusão turbulenta ar+CH₄ em zonas diferentes da chama ([Dibble *et al.*, 1987]).

Nas condições em que as escalas de tempo das reacções químicas são inferiores às escalas de tempo dos transportes difusivo e convectivo (regime de *flamelet*) e em que $Le_k = 1$, as equações de transporte das fracções mássicas e da entalpia conduzem a equações aproximadas em que as variáveis dependentes se exprimem como funções de uma

única variável independente, a fracção de mistura, e dum parâmetro, a taxa de dissipação da fracção de mistura χ , relacionada com os gradientes das concentrações.

[Lentini, 1994] identifica o regime de *flamelet* pela condição de que a escala de tempo das reacções químicas seja menor que a escala de tempo de Kolmogorov. Esta condição corresponde à desigualdade

$$\frac{Z_{est}^2 \cdot (1 - Z_{est})^2}{\chi_q} < \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.16)$$

sendo Z_{est} o valor da fracção de mistura estequiométrica e χ_q o valor crítico da taxa de dissipação escalar para a extinção da chama.

Nestas condições, das equações de transporte de escalares podem deduzir-se equações diferenciais aproximadas, nas quais a única variável independente é a fracção de mistura.

Considerando $Le_k = 1$, a equação de transporte da entalpia (2.22), com utilização das equações (2.5), (2.18) e (2.19), pode ser transformada numa equação em que a variável dependente é a temperatura ([Peters, 1984]),

$$L(T) = -\sum_k \frac{h_k}{c_p} \rho_k^g + \sum_k \frac{c_{p_k}}{c_p} \rho D \frac{\partial Y_k}{\partial y_\alpha} \frac{\partial T}{\partial y_\alpha} + \frac{\lambda}{c_p^2} \frac{\partial c_p}{\partial y_\alpha} \frac{\partial T}{\partial y_\alpha} + \frac{s_{rad}}{c_p}, \quad (3.17)$$

em que λ é a condutividade térmica e o operador L se define por

$$L \equiv \rho \frac{\partial}{\partial t} + \rho v_\alpha \frac{\partial}{\partial y_\alpha} - \frac{\partial}{\partial y_\alpha} \left(\rho D \frac{\partial}{\partial y_\alpha} \right) \quad (3.18)$$

Neste regime é possível transformar as equações (2.5) e (3.17) em equações cuja variável independente seja a fracção de mistura. Pelo facto de as reacções neste regime ocorrerem preferencialmente em superfícies próximas da composição estequiométrica, a difusão das espécies que alimentam a combustão dá-se principalmente na direcção em que os gradientes de concentração são mais elevados que é a direcção perpendicular à superfície estequiométrica. [Peters, 1984] utilizou novas variáveis independentes para substituição das variáveis de espaço y_α , sendo as novas variáveis a fracção de mistura (perpendicular à superfície estequiométrica) e duas outras coordenadas Z_2 e Z_3 paralelas à superfície estequiométrica. A mudança de coordenadas nas equações de transporte é efectuada substituindo as derivadas em relação às antigas coordenadas de espaço e de tempo pelas derivadas em relação às novas variáveis por intermédio da transformação

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z} \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial y_1} = \frac{\partial Z}{\partial y_1} \frac{\partial}{\partial Z} \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial y_k} = \frac{\partial}{\partial Z_k} + \frac{\partial Z}{\partial y_k} \frac{\partial}{\partial Z} \quad (3.19)$$

Com a utilização das novas coordenadas, as equações (2.5) e (3.17) tomam a forma

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial T}{\partial t} = & \frac{1}{2} \rho \chi \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{1}{c_P} \frac{\partial c_P}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{1}{c_P} \frac{\partial T}{\partial Z} \cdot \sum_k c_{Pk} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \right) \\ & - \frac{1}{c_P} \sum_k \dot{\rho}_k^g h_k + \frac{1}{c_P} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + q_R \right) - R(T) \end{aligned} \quad (3.20)$$

e

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \cdot \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\rho}_k^g - R(Y_k) , \quad (3.21)$$

em que

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial y_\alpha} \right)^2 \quad (3.22)$$

é a taxa de dissipação escalar e R é uma função contendo derivadas em ordem a Z_2 e Z_3 , que se pode desprezar face aos termos que contêm derivadas em ordem a Z ([Peters, 1983]). Estando todos os termos convectivos incluídos no termo R , a descrição das variáveis escalares numa *flamelet* é feita em termos da fracção de mistura e da taxa de dissipação escalar, sendo independente (no âmbito das aproximações usadas) das variáveis geralmente usadas na descrição dos escoamentos, particularmente a velocidade. O termo $\frac{1}{2}\chi$ tem funções de coeficiente de difusão no espaço dos Z , influenciando o transporte de reagentes até às zonas de reacção mais intensa, assim como o transporte de calor dissipado a partir dessas zonas.

Numa *flamelet* laminar, os valores de temperatura e composição química podem ser calculados como função de Z para cada valor de χ por resolução das equações (3.20) e (3.21). A validade destas soluções depende da possibilidade de desprezar o termo R , o que é certamente o caso na proximidade da superfície estequiométrica, onde a derivada em ordem a Z é de ordem superior às derivadas nas direcções paralelas à superfície estequiométrica.

3.2.4 A interacção da combustão com a turbulência

As taxas de aniquilação e formação de espécies químicas num determinado ponto dependem, além da temperatura, das concentrações das espécies químicas aí existentes. A intensidade da turbulência tem efeitos sobre as taxas de transporte dos reagentes até às zonas de reacção mais intensa, afectando as concentrações. As taxas de reacção são

assim influenciadas pela turbulência. O fenómeno inverso ocorre igualmente. Nos escoamentos turbulentos com combustão, as reacções químicas causam variações da composição química e da temperatura, conduzindo a alterações da massa específica e de propriedades de transporte do fluido. A combustão provoca assim alterações no escoamento do fluido. Nesta subsecção abordamos a interacção entre a turbulência e a combustão.

Num escoamento reactivo turbulento considerado instantâneamente constituído por um conjunto de *flamelets*, a tarefa de calcular a composição em cada ponto envolve o cálculo dos valores de (Z, χ) com base nos quais se determina a composição. Os valores médios de grandezas escalares ϕ podem ser determinados se se conhecerem as funções instantâneas $\phi(Z, \chi)$ assim como a função densidade de probabilidade $P(Z, \chi)$.

A função densidade de probabilidade tanto pode ser determinada resolvendo uma equação de transporte de P , como assumindo formas funcionais pré-definidas que se ajustem às observações experimentais. A utilização de diferentes formas funcionais geralmente usadas para a função densidade de probabilidade não tem influência significativa nos valores médios calculados das grandezas escalares ([Jones, 1979]), obtendo-se em geral resultados em bom acordo com os dados experimentais.

Para o cálculo das concentrações médias num jacto turbulento não reactivo e não pré-misturado, [Spalding, 1971a] utilizou uma função densidade de probabilidade numa fracção mássica, composta de duas funções delta de Dirac. Ao longo duma direcção radial, a variância das concentrações reproduz de muito perto os resultados experimentais, quando ambos são normalizados pelo valor no eixo. [Lockwood e Naguib, 1975] utilizaram uma função densidade de probabilidade mais verosímil, descrita mais adiante nesta subsecção, para o cálculo das flutuações da fracção de mistura em escoamentos turbulentos. No trabalho destes últimos autores, os resultados das simulações realizadas utilizando as equações de transporte de \tilde{Z} e $\widetilde{Z'^2}$ são próximos dos experimentais, quer para as variáveis médias e suas flutuações em escoamentos não reactivos, quer para as temperaturas médias calculadas para escoamentos com combustão. As médias calculadas utilizaram perfis de $T(Z)$ determinados para escoamentos laminares.

A variância de Z é determinada pela equação de transporte

$$\frac{\partial \widetilde{\rho Z''^2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\widetilde{\rho u_i Z''^2} \right) = \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\frac{\mu_t}{Pr_{Z''^2}} \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial y_i} \right) + 2 \frac{\mu_t}{Pr_{Z''^2}} \left(\frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial y_i} \right)^2 - \widetilde{\rho \chi} \quad (3.23)$$

Muitos modelos para simulação de escoamentos turbulentos reactivos exigem o recurso a mecanismos reduzidos de reacção química, devido à morosidade associada ao cálculo de todas as taxas de formação de espécies químicas às diversas temperaturas a que a combustão ocorre num escoamento, quando as reacções são descritas detalhadamente. Este problema é evitado no modelo de *flamelets*. No regime em que este modelo se aplica, as escalas de tempo das reacções químicas são suficientemente inferiores às escalas de tempo do transporte laminar e turbulento de espécies. Assim é possível gerar uma tabela que descreve o estado termoquímico da mistura, em termos das fracções mássicas das espécies e da temperatura, em função dos valores instantâneos da composição química e da taxa de dissipação escalar. O conhecimento da composição está facilitado nos casos em que se pode considerar $Le = 1$, casos em que, no regime de *flamelet*, toda a composição química é conhecida a partir de dois parâmetros locais, a fracção de mistura Z e a taxa de dissipação escalar χ .

A solução das equações (3.20) e (3.21) para cada valor do parâmetro χ permite determinar as variáveis T e Y_k como funções do par (χ, Z) . Nos casos em que as paredes não são adiabáticas ou em que, na equação (3.20), o termo q_R varia com y_j , o cálculo de T por intermédio das equações das *flamelets* perde generalidade por depender das coordenadas de espaço. A temperatura pode então ser determinada a partir da entalpia evitando a utilização da equação (3.20).

Considerando uma chama turbulenta como composta por um conjunto de *flamelets*, o valor médio duma variável escalar ϕ em determinado ponto pode ser calculado a partir dos seus valores instantâneos nas *flamelets*, desde que se conheça a função densidade de probabilidade $P(\chi, Z)$ de existência do valor (χ, Z) nesse ponto:

$$\tilde{\phi} = \int_0^\infty \int_0^1 \phi(\chi, Z) \tilde{P}(\chi, Z) dZ d\chi . \quad (3.24)$$

Os dados experimentais sugerem que há uma pequena dependência estatística entre χ e Z ([Meyers e O'Brien, 1981]). Na maioria dos casos considera-se, no entanto, que a aproximação da independência estatística reflecte com precisão a realidade experimental

([Bilger, 1980]), pelo que a *f.d.p.* conjunta se pode factorizar de acordo com:

$$\tilde{P}(\chi, Z) = \tilde{P}(Z) \cdot \tilde{P}(\chi) . \quad (3.25)$$

Os valores médios da fracção mássica das espécies podem assim ser determinados a partir da expressão

$$\tilde{Y}_k = \int_0^1 \tilde{P}(Z) dZ \int_0^\infty \tilde{P}(\chi) Y_k(Z, \chi) d\chi . \quad (3.26)$$

Para $\tilde{P}(Z)$ adoptamos a proposta de [Lockwood e Naguib, 1975] que consiste na escolha de uma distribuição de Gauss truncada em $Z = 0$ e $Z = 1$, valores para os quais se usam deltas de Dirac multiplicados por constantes resultantes da integração da distribuição de Gauss não truncada entre $-\infty$ e 0 e entre 1 e $+\infty$, respectivamente:

$$\begin{aligned} \tilde{P}(Z) &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{Z - \mu}{\sigma} \right)^2 \right] && \text{em } 0 < Z < 1 \\ &= \int_{-\infty}^0 \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{Z - \mu}{\sigma} \right)^2 \right] dZ && \text{em } Z = 0 \\ &= \int_1^{\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{Z - \mu}{\sigma} \right)^2 \right] dZ && \text{em } Z = 1 . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Os parâmetros μ e σ que determinam a forma da gaussiana são determinados a partir dos valores locais de \tilde{Z} e $\widetilde{Z''^2}$, como descrito em [Liew *et al.*, 1981]. Os valores de \tilde{Z} e $\widetilde{Z''^2}$ no domínio de cálculo do escoamento são obtidos por resolução das suas equações de transporte (2.31) e (3.23).

O cálculo da composição química em regime turbulento não sofre alterações significativas se se substituir a *f.d.p.* descrita por outras que assumam formas igualmente realistas. É o que sucede com a função β apesar de, ao contrário da forma apresentada, não permitir singularidades em $Z = 0$ e $Z = 1$ simultâneamente com um máximo relativo em valores de Z intermédios.

$\tilde{P}(\chi)$ apresenta uma distribuição log-normal ([Kolmogorov, 1962]), podendo no entanto utilizar-se uma função delta de Dirac ([Pitsch e Peters, 1998]):

$$\tilde{P}(\chi) = \delta(\chi - \tilde{\chi}) . \quad (3.28)$$

O valor de $\tilde{\chi}$ é determinado pela expressão ([Jones e Whitelaw, 1982])

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{Z''^2} \quad (3.29)$$

em que $C_\chi = 2$.

Conhecendo a pressão, a massa volúmica instantânea na *flamelet* χ no ponto Z pode ser determinada pela equação (2.6). O cálculo de $\bar{\rho}$ obtém-se a partir de

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^1 \tilde{P}(Z) dZ \int_0^\infty \tilde{P}(\chi) \frac{1}{\rho(Z, \chi)} d\chi . \quad (3.30)$$

Para o cálculo dos valores médios de uma variável ϕ com base nas equações (3.24) e (3.25), efectua-se uma integração numérica que recorre aos seguintes passos:

1. Elaboração de uma tabela de valores instantâneos $(Z, \chi) \longrightarrow \phi$ calculados pelo modelo das *flamelets*.
2. Geração de uma tabela $(\tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}) \longrightarrow (\mu, \sigma)$.
3. Em cada nó do domínio de cálculo, os valores determinados de \tilde{Z} e $\widetilde{Z''^2}$ são usados para determinar os parâmetros μ e σ por interpolação na tabela gerada em 2.
4. Determinação da forma concreta de $\tilde{P}(Z)$ por substituição dos valores de μ e σ na equação (3.27).
5. Divisão dos domínios de Z e χ em intervalos ΔZ_i e $\Delta \chi_j$ e integração numérica de ϕ por intermédio de expressões tais como:

$$\tilde{\phi} = \sum_{i,j} \phi(Z_i, \chi_j) \cdot \tilde{P}(Z_i) \tilde{P}(\chi_j) \cdot \omega_i \omega_j , \quad (3.31)$$

em que ω_i e ω_j são os pesos de integração.

Nas chamas em que a variação de pressão é pequena, as trocas radiativas são desprezáveis e as fronteiras se possam considerar adiabáticas, o valor médio da temperatura pode ser calculado de forma análoga ao cálculo de \widetilde{Y}_k . No nosso caso as duas últimas condições não se verificam. A entalpia média será calculada pela sua equação de transporte (2.33). A temperatura é calculada a partir da entalpia usando o método iterativo de Newton para determinar $T(\tilde{h})$ a partir de $\tilde{h}(T)$, obtida das equações (2.18) e (2.19).

Das equações (2.18), (2.24) e (2.27), obtemos:

$$\tilde{h} = \sum_k \left(\widetilde{h_k Y_k} + \widetilde{h_k'' Y_k''} \right) . \quad (3.32)$$

No modelo das *flamelets*, as variações instantâneas de h_k e Y_k podem ser determinadas a partir das variações instantâneas de Z e χ . Para pequenas variações instantâneas Z'' e

χ'' , as variações h_k'' e Y_k'' podem ser determinadas por diferenciação das funções $h_k(Z, \chi)$ e $Y_k(Z, \chi)$, obtendo em primeira aproximação

$$h_k'' = \frac{\partial h_k}{\partial Z} Z'' + \frac{\partial h_k}{\partial \chi} \chi'' \quad \text{e} \quad Y_k'' = \frac{\partial Y_k}{\partial Z} Z'' + \frac{\partial Y_k}{\partial \chi} \chi'' , \quad (3.33)$$

de onde se obtém a expressão

$$h_k'' Y_k'' = \left(\frac{\partial h_k}{\partial Z} Z'' + \frac{\partial h_k}{\partial \chi} \chi'' \right) \cdot \left(\frac{\partial Y_k}{\partial Z} Z'' + \frac{\partial Y_k}{\partial \chi} \chi'' \right) . \quad (3.34)$$

A média dos termos contendo χ'' pode ser efectuada da forma seguinte, aplicada a um dos termos da equação (3.34), por exemplo $f = \frac{\partial h_k}{\partial Z} Z'' \frac{\partial Y_k}{\partial \chi} \chi''$:

$$\tilde{f} = \int_0^1 \frac{\partial h_k}{\partial Z} (Z - \tilde{Z}) \tilde{P}(Z) dZ \int_0^\infty \tilde{P}(\chi) \frac{\partial Y_k}{\partial \chi} (\chi - \tilde{\chi}) d\chi . \quad (3.35)$$

A seguinte propriedade da função delta de Dirac,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a) \quad (3.36)$$

implica, pela equação (3.28), que o integral em χ da equação (3.35) é nulo. A função densidade de probabilidade de χ sendo dada pela equação (3.28), todos os termos do segundo membro da equação (3.34), com excepção do termo

$$\frac{\partial h_k}{\partial Z} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} Z''^2 , \quad (3.37)$$

têm média nula. A média de Favre deste termo pode ser calculada numericamente, desde que na tabela das *flamelets* se introduzam os valores de h_k , se calculem as derivadas presentes na equação e se expresse Z''^2 na forma $(Z - \tilde{Z})^2$.

Para os valores de Z em que as derivadas $\partial h_k / \partial Z$ e $\partial Y_k / \partial Z$ sejam aproximadamente constantes e fazendo uso da equação (2.19), podemos efectuar uma estimativa da correlação e obter

$$\tilde{h} = \sum_k \widetilde{h_k Y_k} + \sum_k c_{pk} \left(\frac{\partial T}{\partial Z} \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \right)_{Z=\tilde{Z}; \chi=\tilde{\chi}} \cdot \widetilde{Z''^2} . \quad (3.38)$$

As derivadas nesta expressão podem ser calculadas a partir da tabela de *flamelets*, enquanto $\widetilde{Z''^2}$ é determinada por resolução da sua equação de transporte. Em regiões próximas de $Z = Z_{est}$, em que as derivadas da temperatura e de algumas fracções mássicas variam fortemente, poderá realizar-se o cálculo numérico da média de Favre.

Neste trabalho, usamos a aproximação

$$\tilde{h} = \sum \tilde{h}_k \tilde{Y}_k. \quad (3.39)$$

Os valores de \tilde{h}_k são determinados a partir da temperatura com base em ajustamentos polinomiais a dados experimentais cujos coeficientes se encontram tabelados ([Gordon e McBride, 1971]):

$$\tilde{h}_k = R. \left(a_{k1}T + a_{k2}\frac{T^2}{2} + a_{k3}\frac{T^3}{3} + a_{k4}\frac{T^4}{4} + a_{k5}\frac{T^5}{5} + a_{k6} \right), \quad (3.40)$$

em que o índice k se refere às diversas espécies químicas da mistura gasosa. $T(\tilde{h})$ é obtida pelo método iterativo de Newton:

$$T = \lim_{n \rightarrow \infty} T_{n+1} = T_n + \frac{\tilde{h} - \tilde{h}_n}{\left(\frac{\partial \tilde{h}}{\partial T} \right)_{T_n}}. \quad (3.41)$$

3.3 Modelo de radiação

Na combustão, a emissão de radiação tem origem quer nas transições electrónicas que ocorrem nas reacções químicas, quer nas transições electrónicas, vibracionais e rotacionais nas moléculas devidas a colisões intermoleculares, dependendo neste caso essencialmente da temperatura do fluido. A emissão radiativa de origem térmica está presente em toda a mistura e é geralmente mais intensa do que a emissão de origem reactiva, que ocorre essencialmente na zona de chama.

A determinação do campo da radiação térmica envolve o conhecimento dos coeficientes espectrais de emissão, absorção e de dispersão angular. O balanço destas contribuições resulta numa equação diferencial-integral que descreve a propagação da radiação num meio semi-transparente. Nas paredes o balanço radiativo requer o conhecimento angular e espectral da emissão, reflexão e absorção.

Não sendo o meio opaco, as trocas radiativas não podem simplesmente ser descritas pelo modelo difusivo habitual, em que os fluxos são proporcionais a gradientes. De facto, as trocas radiativas efectuem-se simultâneamente quer entre elementos de volume adjacentes quer distantes do gás e entre este e as paredes.

O balanço da energia radiativa é em geral efectuado considerando um feixe de radiação e as trocas do feixe com o seu exterior. Estas trocas podem ter lugar por dispersão

em partículas, contribuindo para a diminuição de intensidade do feixe ou para o seu aumento por dispersão de outros feixes que passem a integrar o feixe considerado. O feixe diminui de intensidade também por absorção por parte das partículas e gás que atravessa. E aumenta de intensidade por via das emissões de radiação das partículas e gás na direcção do feixe. As trocas radiativas com as paredes dependem das suas propriedades de emissão, reflexão e absorção.

Todos estes fenómenos dependem da temperatura do meio, da sua composição e estrutura da superfície (no caso das paredes). Em relação aos balanços radiativos nas paredes, introduzem-se normalmente simplificações quanto à direccionalidade da emissão, reflexão e absorção de radiação. Geralmente utilizam-se simplificações relativas às propriedades espectrais dos gases. O cálculo dos efeitos das propriedades espectrais dos gases nos balanços de energia é efectuado por exemplo em [Coelho *et al.*, 2002].

O balanço de energia dum feixe de radiação pode ser expresso por (ver por exemplo [Modest, 1993]):

$$\frac{dI}{ds} = -(k_a + k_d) I + k_a \frac{E_g}{\pi} + \frac{k_d}{4\pi} \int_0^{4\pi} P(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') I(\vec{\Omega}') d\vec{\Omega}', \quad (3.42)$$

em que I é a intensidade da radiação que se propaga na direcção $\vec{\Omega}$, s é a distância na direcção $\vec{\Omega}$, $E_g \equiv \sigma T_g^4$ é o poder emissivo do corpo negro à temperatura T_g , k_a e k_d são os coeficientes de absorção e dispersão do meio, e $P(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ é a probabilidade de que a radiação incidente num ângulo sólido $d\Omega'$ centrado na direcção $\vec{\Omega}'$ seja dispersada no ângulo sólido $d\Omega$ em torno da direcção $\vec{\Omega}$; σ ($= 5.67051 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$) é a constante de Stefan-Boltzmann.

A integração numérica directa da equação de transporte da radiação requer a discretização dos ângulos sólidos em todo o domínio 4π para cada volume de controlo da discretização do espaço da câmara de combustão. Em princípio, o cálculo em todas as direcções discretizadas e em todo o volume discretizado seria efectuado em cada iteração da simulação numérica do escoamento com combustão. Este procedimento implicaria um tempo de cálculo excessivo. Por este motivo, a equação (3.42) é resolvida com recurso a modelos simplificados para a obtenção do termo fonte radiativo na equação de transporte da entalpia. Vários desses modelos são descritos em [Modest, 1993].

No modelo de zonas de [Hottel e Cohen, 1958], as paredes e o volume de gás são

divididos em zonas com propriedades uniformes no interior de cada zona. As trocas de energia entre cada par de zonas são calculadas, conduzindo a um sistema de equações que permite determinar os fluxos de calor na fronteira e as fontes e poços de energia radiativa no meio gasoso.

No modelo dos momentos ([Ozisik, 1973]), assim como no modelo dos fluxos ([Marco e Lockwood, 1975]), a intensidade da radiação é expandida por uma série de Taylor truncada, sendo esta expressão substituída na equação de transporte da radiação.

O modelo da transferência discreta ([Lockwood e Shah, 1981]) considera feixes de radiação em direcções escolhidas entre pares de paredes e efectua de forma analítica o balanço de energia de cada feixe em cada volume de controlo discreto atravessado. O fluxo de energia de todos os feixes numa parede é relacionado com a emissão térmica da parede. O termo fonte a introduzir na equação da energia é obtido com base no balanço energético dos feixes em cada volume de controlo.

No método das ordenadas discretas ([Chandrasekhar, 1950], [Fiveland, 1982]), o domínio dos ângulos sólidos é dividido em ângulos sólidos discretos nas várias direcções. A equação (3.42) é resolvida numericamente para cada um dos ângulos sólidos discretizados.

O método de Monte Carlo (ver por exemplo [Modest, 1993]) aplicado ao transporte de energia radiativa simula a emissão, absorção e dispersão de energia através de uma sequência de acontecimentos individuais. A emissão de um feixe radiativo ocorre com valores iniciais da posição, direcção e comprimento de onda escolhidos aleatoriamente. O destino desse feixe é determinado por escolha aleatória entre as possibilidades de continuação de percurso rectilíneo, de dispersão, reflexão em superfície sólida ou absorção. As escolhas destes acontecimentos são calculadas por geradores de números aleatórios proporcionalmente às intensidades radiativas da dispersão, absorção e reflexão do feixe em causa e as energias envolvidas contabilizadas. Desta forma, os fluxos e as fontes ou poços de radiação são calculados a partir das médias encontradas para um número estatisticamente significativo de simulações elementares.

As variações de temperatura e composição na combustão turbulenta tem efeitos não lineares nos fluxos radiativos. A determinação da interacção da turbulência com a radiação é feita por exemplo em [Song e Viskanta, 1987] e [Coelho *et al.*, 2002].

No modelo de radiação adoptado, a espessura óptica do meio é considerada suficientemente pequena, de tal modo que as trocas radiativas entre elementos do gás são

desprezadas em face das trocas entre o gás e as paredes.

Outra simplificação introduzida consiste em considerar que as trocas com as paredes se podem calcular considerando que, para cada elemento de volume, a temperatura da parede é uniforme e igual ao valor registado no ponto da parede mais próximo do elemento de volume em consideração. Este procedimento, introduzindo simplificações substanciais, poderá dar origem a um certo erro no termo fonte da equação da entalpia, dado que a temperatura em quase toda a superfície das paredes apresenta valores entre os $1100K$ e os $1300K$, enquanto os valores da temperatura da mistura gasosa depois da reacção se situa em valores até aos $2000K$.

As perdas de energia térmica por unidade de volume em trocas radiativas é calculada pela expressão ([Submodels, 1998])

$$\dot{Q}_{rad} = 4\sigma \cdot \sum_k (p_k \cdot a_{Pk}) \cdot (T^4 - T_p^4) \quad (3.43)$$

em que σ é a constante de Stefan-Boltzmann, p_k é a pressão parcial da espécie k , a_{Pk} é o coeficiente de absorção médio de Planck da espécie k , e T e T_p são as temperaturas absolutas do gás e da parede. Os termos a_{Pk} são calculados com base em expressões apresentados na mesma referência. Para o cálculo da emissão radiativa do gás, consideraram-se as espécies químicas mais significativas, H_2O , CO_2 , CO e CH_4 . Para as duas primeiras espécies, a_P é representado sob a forma

$$a_P = \sum_{n=0}^5 c_n \cdot \left(\frac{1000}{T} \right)^n \quad (3.44)$$

em que os coeficientes c_n têm os valores indicados na tabela 3.2:

	H_2O	CO_2
c_0	-0.23093	+18.741
c_1	-1.12390	-121.310
c_2	+9.41530	+273.500
c_3	-2.99880	-194050
c_4	+0.51382	+56.310
c_5	-1.8684×10^{-5}	-5.8169

Tabela 3.2: Valores dos coeficientes c_n da equação (3.44).

Para o metano a expressão de a_P é a seguinte:

$$a_P = 6.6334 - 0.0035686 \times T + 1.6682 \times 10^{-8} \times T^2 + 2.5611 \times 10^{-10} \times T^3 - 2.6558 \times 10^{-14} \times T^4 \quad (3.45)$$

e, para o CO , a expressão de a_P é a seguinte:

$$a_P = c_0 + T \cdot \{c_1 + T \cdot [c_2 + T \cdot (c_3 + T \cdot c_4)]\} \quad , \quad (3.46)$$

em que os coeficientes c dependem da temperatura de acordo com a tabela 3.3.

	$T \leq 750K$	$T > 750K$
c_0	+4.7869	+10.09
c_1	-0.06953	-0.01183
c_2	$+2.95775 \times 10^{-4}$	$+4.7753 \times 10^{-6}$
c_3	-4.25732×10^{-7}	-5.87209×10^{-10}
c_4	-1.86840×10^{-10}	-2.5334×10^{-14}

Tabela 3.3: Valores dos coeficientes c_n da equação (3.46).

Capítulo 4

Modelo matemático

Os modelos físicos e químicos da combustão turbulenta apresentados nos capítulos anteriores são descritos por intermédio de um sistema de equações diferenciais. Os parâmetros que constam nessas equações podem ser constantes ou podem ser calculados directa ou indirectamente por intermédio de relações algébricas, permitindo o fecho do sistema de equações.

O sistema de equações diferenciais e algébricas que descreve o escoamento reactivo não tem solução analítica, pelo que a determinação dos campos das variáveis dependentes é feita com recurso a métodos numéricos. O método de cálculo usado neste trabalho baseia-se no método dos volumes finitos. O domínio de cálculo é dividido em volumes de controlo que preenchem completamente esse domínio. Integrando as equações diferenciais no volume de controlo, estas são transformadas em equações algébricas aproximadas. O sistema de equações algébricas pode ser resolvido em ordem às variáveis dependentes, obtendo-se os campos destas variáveis em função do espaço e do tempo discretizados.

A discretização pode ser efectuada usando um sistema de coordenadas cartesianas. A geometria das fronteiras pode no entanto ser pouco regular, criando dificuldades na discretização do espaço e no tratamento numérico das condições de fronteira. Nos casos em que as fronteiras não têm geometrias simples, não é fácil fazer coincidir as faces dos volumes de controlo com as fronteiras. Por este motivo, desenvolveram-se métodos de coordenadas cartesianas em que os volumes de controlo das fronteiras são seccionados, métodos usando malhas não estruturadas e malhas em coordenadas curvilíneas não ortogonais. Neste caso as equações de transporte devem ser expressas nestas coordenadas

espaciais.

A simulação do escoamento reactivo é efectuada com base na resolução de equações de transporte que permitem a determinação dos valores médios da pressão, componentes da velocidade, fracções mássicas e temperatura. O modelo matemático inclui um conjunto de equações discretizadas que resulta das equações (2.30)-(2.33), (3.10) e (3.11), com alguns dos seus termos modelados para permitir o fecho do sistema.

Pelo facto de ser necessário conhecer o campo de pressões e de não existir entre as equações apresentadas nenhuma equação de transporte da pressão, torna-se necessário um método para cálculo da pressão a partir da equação da continuidade. No método a utilizar para o cálculo da pressão, esta deve ser calculada em conjunto com a velocidade.

O campo da temperatura é determinado a partir do campo da entalpia. Uma vez determinados os valores de \tilde{h} por solução da equação (2.33), resolve-se a equação $\tilde{h}(T)$ (3.39) para obter $T(\tilde{h})$.

Os valores médios das fracções mássicas Y_k não são obtidos pela solução das suas equações de transporte discretizadas. Os valores instantâneos de Y_k são determinados fazendo uso do modelo das *flamelets*. A equação (3.21) é discretizada e os valores de Y_k calculados como funções dos valores instantâneos e discretos de Z e χ . Usando a f.d.p. destas variáveis, os valores médios das fracções mássicas podem ser obtidos por integração numérica, conforme descrito no capítulo anterior.

No método dos volumes finitos, as equações de transporte algébricas, resultantes da discretização das equações de transporte diferenciais, relacionam os valores das variáveis dependentes em volumes de controlo que são vizinhos próximos. A solução de sistemas de equações deste tipo é efectuada por métodos iterativos, indicados nos casos em que as equações não são lineares e o número de equações é elevado.

4.1 As equações de transporte em coordenadas curvilíneas não ortogonais

Nas equações de transporte em coordenadas curvilíneas não ortogonais podem utilizar-se componentes das velocidades paralelas às coordenadas, como, por exemplo, em [Demirdzic, 1982]. No entanto, para o cálculo numérico de escoamentos, esta opção

requer geralmente curvaturas moderadas nas coordenadas espaciais, o que nem sempre é adequado à geometria do escoamento. Outra alternativa consiste na utilização, em conjunto com as coordenadas curvilíneas, das componentes cartesianas da velocidade (v. p. ex. [Hirt *et al.*, 1974]). Nesta opção não estão presentes nas equações os termos de curvatura das coordenadas, pelo que a sua utilização não é tão sensível às propriedades da malha. É este tipo de representação para as componentes dos vectores e tensores que será usada neste trabalho, adoptando a nomenclatura apresentada em [Peric, 1985].

Designaremos as coordenadas cartesianas por y_i e as coordenadas curvilíneas por x_i .

A transformação das derivadas cartesianas em derivadas em ordem às coordenadas curvilíneas é obtida por

$$\frac{\partial}{\partial y_i} = \frac{\partial x_j}{\partial y_i} \frac{\partial}{\partial x_j} . \quad (4.1)$$

A equação de conservação da massa (2.30) transforma-se em

$$J \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial U_j}{\partial x_j} = 0 , \quad (4.2)$$

em que

$$U_j = \bar{\rho} \tilde{u}_i \beta_{ji} , \quad (4.3)$$

e

$$\beta_{ji} = J \frac{\partial x_j}{\partial y_i} . \quad (4.4)$$

em que J é o jacobiano da transformação de coordenadas $y_i = y_i(x_j)$.

O volume diferencial dV expresso em termos das coordenadas curvilíneas tem a expressão ([Peric, 1985])

$$dV = J dx_1 dx_2 dx_3 . \quad (4.5)$$

A utilização da transformação de variáveis independentes na equação de transporte do valor médio de uma variável escalar ϕ , equação (2.28), utilizando componentes cartesianas da velocidade, conduz à equação

$$J \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(U_j \tilde{\phi} - \frac{\Gamma_\phi}{J} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} B_{jk} \right) = J \bar{s}_\phi , \quad (4.6)$$

em que

$$B_{ij} = \beta_{jk} \beta_{ik} , \quad (4.7)$$

$\Gamma_\phi = \frac{\mu}{Pr_\phi}$ é o coeficiente de difusão de $\tilde{\phi}$ e \bar{s}_ϕ o termo fonte.

A equação de conservação do momento linear toma a forma

$$J \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[U_j \tilde{u}_i - \frac{\mu}{J} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} B_{jk} + \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_k} \beta_{ki} \beta_{jm} - \frac{2}{3} \delta_{im} \frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_k} \beta_{kn} \beta_{jm} \right) - \frac{2}{3} \delta_{im} \bar{\rho} k \beta_{jm} + \bar{p} \beta_{ji} \right] = J \bar{s}_{u_i} . \quad (4.8)$$

4.2 Discretização das equações de transporte

Os métodos numéricos usados para resolver os problemas de escoamento de fluidos são variados e transformam as equações diferenciais em equações algébricas aproximadas. Nos métodos espectrais (ver [Gottlieb e Orszag, 1977]), os operadores diferenciais mantêm-se inalterados, enquanto as variáveis dependentes são decompostas em séries truncadas de funções ortogonais.

No método dos elementos finitos, o domínio de cálculo é dividido em elementos, em cada um dos quais a variável dependente é representada por uma função, geralmente um polinómio. A aplicação desta forma aproximada na equação de transporte conduz a um resíduo cuja minimização permite a correcção dos coeficientes. No método dos elementos finitos, cada variável dependente é substituída por um conjunto de funções simples cada uma delas válida em cada volume do domínio discretizado. A substituição destas funções nas equações de transporte gera erros de conservação. A correcção destes erros permite recalcular os coeficientes das funções propostas e aproximar-se da solução exacta do problema (ver por exemplo [Zienkiewicz e Taylor, 1991]).

No método das diferenças finitas, o domínio é representado por um conjunto de nós em que a variável dependente é expressa por uma série de Taylor. A série é truncada e inserida na equação de transporte. Substituindo as derivadas por diferenças finitas, obtém-se uma equação algébrica de transporte aproximada. Estas séries são truncadas para permitir o cálculo aproximado dum número finito de coeficientes.

O método de discretização escolhido é o método dos volumes finitos. Neste método, o domínio é dividido em volumes de controlo nos quais as equações de transporte são integradas. As derivadas que subsistem após a integração são substituídas por diferenças finitas, resultando em equações algébricas em todos os nós representativos dos volumes de controlo do domínio de cálculo. Os valores dos fluxos da variável dependente

nas interfaces entre volumes de controlo são expressos de forma a terem um valor único, conferindo um carácter conservativo às equações algébricas de transporte. Dado o número de nós envolvido (e portanto o número de equações) e pelo facto de estas não serem lineares, a forma mais económica de resolver o sistema de equações de transporte consiste na utilização de métodos de solução iterativos.

As malhas que dividem o domínio de cálculo em volumes de controlo podem ser de vários tipos. As malhas rectilíneas ortogonais são as de mais simples utilização, apresentando problemas nas fronteiras irregulares. Estes problemas podem ser ultrapassados pela utilização de condições de fronteira em que os volumes de controlo são constituídos por fracções de sólido e de fluido. Em fronteiras complexas, é vantajosa a aplicação de malhas de alta densidade local. Nestes casos, com o uso de malhas rectilíneas, estas densidades elevadas só podem ser atingidas recorrendo a novas malhas refinadas nessas regiões. As malhas curvilíneas não ortogonais possuem a flexibilidade suficiente para se ajustarem a fronteiras complexas, embora as equações de transporte tomem formas mais complexas. As malhas não estruturadas apresentam flexibilidade total, quer no que diz respeito ao acompanhamento de fronteiras, quer na escolha das densidades apropriadas da malha. No entanto apresentam complexidades maiores em termos da discretização das equações de transporte.

4.2.1 Discretização das variáveis independentes

Nas equações de transporte a serem discretizadas, as variáveis de espaço utilizadas são curvilíneas não ortogonais. Mantêm-se no entanto as componentes cartesianas das velocidades. A discretização é efectuada pelo método dos volumes finitos e baseia-se nos métodos apresentados em ([Peric, 1985]).

Os termos das equações diferenciais são integrados em cada volume de controlo em que se divide o domínio de cálculo. O valor das variáveis dependentes é considerado uniforme no interior de cada volume de controlo. Os fluxos das variáveis dependentes nas faces dos volumes de controlo são calculados através de valores interpolados dessas variáveis. A atribuição de valores únicos aos fluxos em cada face torna possível uma análise conservativa das grandezas físicas que figuram como variáveis dependentes nas equações.

Nos sistemas com geometria cilíndrica, os volumes de controlo da malha têm

igualmente esta simetria, como representado na figura 4.1. Na discretização, o valor de $\delta\theta$ terá um valor unitário. A distância δx_i entre nós sucessivos na direcção x_i da malha curvilínea pode, sem perda de generalidade, ser considerada unitária ([Peric, 1985]).

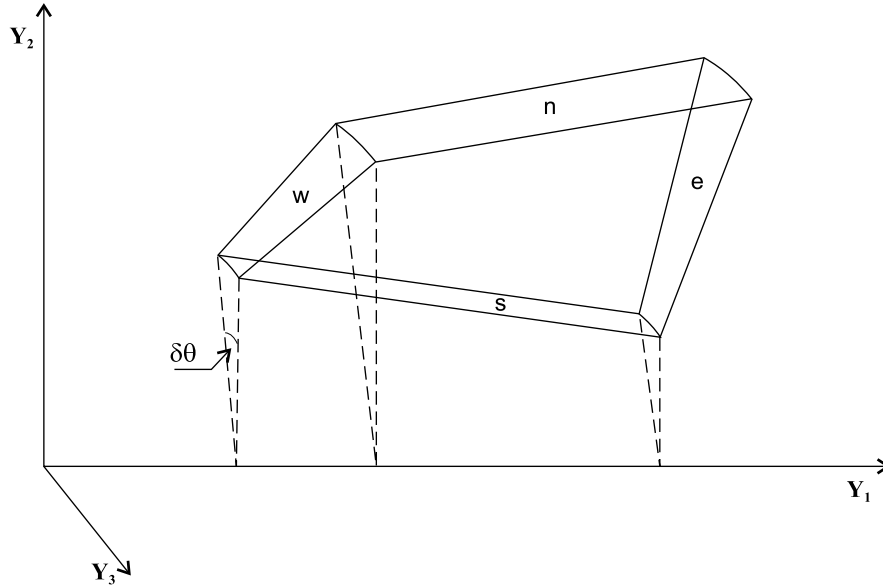


Figura 4.1: Volume de controlo com simetria cilíndrica.

Para a discretização das equações de transporte, os termos das equações (4.2), (4.6) e (4.8) são integrados num volume de controlo genérico δV_P que engloba o nó P da malha (figura 4.2).

Nas equações de transporte apresentadas, existem derivadas em ordem ao tempo que representam a não estacionaridade dos fenómenos, termos representando os fluxos convectivos e difusivos e termos fonte. Para se efectuar a discretização, todos estes termos são integrados no volume de controlo δV . Estes integrais são substituídos por expressões algébricas aproximadas em que as variáveis contínuas são substituídas por variáveis discretas.

Utilizando o teorema de Gauss, o integral de volume dos termos de transporte convectivo e difusivo pode ser expresso por intermédio de integrais de superfície sobre as fronteiras do volume de controlo, resultando em fluxos da variável dependente sobre as faces do volume de controlo. Nestas integrações, consideram-se uniformes os valores das

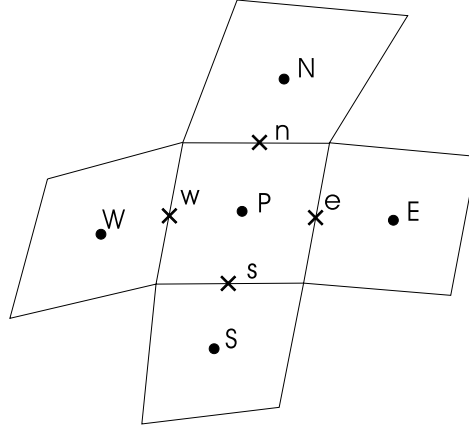


Figura 4.2: Projecção em $Y_1 - Y_2$ do volume de controlo P e seus vizinhos próximos segundo os eixos X_1 e X_2 . As faces entre volumes de controlo são representadas por letras minúsculas.

variáveis dependentes sobre as faces. O termo fonte é discretizado directamente efectuando a integração volúmica. Nestas integrações, considera-se uniforme o valor do termo fonte no volume de controlo e igual ao seu valor no ponto representativo P .

(i, j)	C_i	b_{ij}
$(1, 1)$	$\frac{1}{\delta x_2 \delta x_3}$	$(\delta y_2)^2 (\delta y_3)^3 - (\delta y_2)^3 (\delta y_3)^2$
$(1, 2)$	"	$(\delta y_1)^3 (\delta y_3)^2 - (\delta y_1)^2 (\delta y_3)^3$
$(1, 3)$	"	$(\delta y_1)^2 (\delta y_2)^3 - (\delta y_1)^3 (\delta y_2)^2$
$(2, 1)$	$\frac{1}{\delta x_1 \delta x_3}$	$(\delta y_3)^1 (\delta y_2)^3 - (\delta y_3)^3 (\delta y_2)^1$
$(2, 2)$	"	$(\delta y_1)^1 (\delta y_3)^3 - (\delta y_1)^3 (\delta y_3)^1$
$(2, 3)$	"	$(\delta y_1)^3 (\delta y_2)^1 - (\delta y_1)^1 (\delta y_2)^3$
$(3, 1)$	$\frac{1}{\delta x_1 \delta x_2}$	$(\delta y_2)^1 (\delta y_3)^2 - (\delta y_2)^2 (\delta y_3)^1$
$(3, 2)$	"	$(\delta y_1)^2 (\delta y_3)^1 - (\delta y_1)^1 (\delta y_3)^2$
$(3, 3)$	"	$(\delta y_1)^1 (\delta y_2)^2 - (\delta y_1)^2 (\delta y_2)^1$

Tabela 4.1 Expressões de C_i e b_{ij} para discretização dos coeficientes β_{ij} .

Os coeficientes β_{ij} de transformação entre coordenadas são discretizados do seguinte modo ([Peric, 1985]):

$$\beta_{ij} \simeq C_i b_{ij} , \text{ (sem adição de termos com índices repetidos)} \quad (4.9)$$

em que as expressões de C_i e b_{ij} são dadas na tabela 4.1. $(\delta y_i)^j$ é a variação da coordenada cartesiana y_i associada à variação da coordenada curvilínea x_j .

Os coeficientes B_{ij} são discretizados por

$$B_{ij} \simeq C_i C_j \cdot b_{ik} b_{jk} , \text{ (adição de termos com índice k repetido).} \quad (4.10)$$

4.2.2 Discretização dos fluxos convectivos

Recorrendo ao teorema de Gauss, a integração volúmica dos termos convectivos da equação (4.2) conduz a integrais de superfície do tipo

$$\int_{A_i} U_i dA_i \simeq \bar{\rho} \tilde{u}_j b_{ij} \equiv F_i \quad (4.11)$$

que representa o fluxo de massa através da superfície A_i transversal à coordenada x_i . Como exemplo, o fluxo de massa na face A_e é calculado por intermédio de:

$$\int_{A_e} (U_1 dA)_e \simeq F_{1e} = (U_1 \delta x_2 \delta x_3)_e = \bar{\rho}_e (\tilde{u}_1 b_{11} + \tilde{u}_2 b_{12} + \tilde{u}_3 b_{13})_e \quad (4.12)$$

U_i é o caudal mássico que atravessa a face i do volume de controlo por unidade de superfície dessa face.

A discretização dos termos convectivos da equação de transporte de $\tilde{\phi}$ conduz a aproximações como a seguinte para o fluxo convectivo sobre a face e :

$$I_e^C = \int_{A_e} U_1 \tilde{\phi} dA \simeq F_{1e} \tilde{\phi}_e \quad (4.13)$$

4.2.3 Discretização dos fluxos difusivos

Os termos da forma $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\Gamma_\phi}{J} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} B_{jk} \right)$ são integrados nos volumes de controlo por meio do teorema de Gauss. Este termo difusivo integrado e discretizado para a face e apresenta a forma aproximada

$$I_e^D \simeq - \left(\frac{\Gamma_\phi}{\delta V} \right)_e D_{11e} (\tilde{\phi}_E - \tilde{\phi}_P) - \left(\frac{\Gamma_\phi}{\delta V} \right)_e \left[D_{12} (\tilde{\phi}_n - \tilde{\phi}_s) + D_{13} (\tilde{\phi}_c - \tilde{\phi}_b) \right]_e \quad (4.14)$$

em que $D_{ij} = b_{ik} b_{jk}$. Os índices minúsculos referem-se a posições sobre as faces. Os termos do tipo $(\tilde{\phi}_n)_e$ (valor de $\tilde{\phi}$ no ponto n da face e) serão calculados por intermédio de interpolações dos valores de ϕ dos nós principais da malha.

Na discretização, as derivadas que persistem após integração com uso do teorema de Gauss são aproximadas por diferenças finitas. Os fluxos difusivos na direcção x_i que

dependem de diferenças entre valores da variável dependente nessa mesma direcção, tal como o primeiro termo na equação (4.14), são designados por termos difusivos "normais". Os fluxos difusivos na direcção x_i que dependem de diferenças entre valores da variável dependente noutras direcções, tal como os dois últimos termos na equação (4.14), referem-se como termos difusivos "cruzados".

Para qualquer das componentes da velocidade u_i , os termos difusivos que incluem os factores B_{jk} são integrados e discretizados de forma análoga à apresentada para a variável ϕ .

A equação (4.8) de transporte da componente i do momento linear inclui no primeiro membro os termos

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\frac{\mu}{J} \left(\frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_k} \beta_{ki} \beta_{jm} - \frac{2}{3} \delta_{im} \frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_k} \beta_{kn} \beta_{jm} \right) - \frac{2}{3} \delta_{im} \bar{\rho} k \beta_{jm} \right], \quad (4.15)$$

que podem ser reescritos na forma

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\frac{\mu}{J} \left(\omega_{mi} - \frac{2}{3} \delta_{im} \omega_{nn} \right) - \frac{2}{3} \delta_{im} \bar{\rho} k \right] \cdot \beta_{jm} \quad (4.16)$$

em que $\omega_{mi} = \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_k} \beta_{ki}$.

O termo ω_{mi} relaciona-se com o fluxo difusivo em malhas não ortogonais, tendo normalmente valores de ordem de grandeza inferior aos dos outros fluxos convectivos e difusivos. Por este motivo se inclui normalmente no termo fonte, tal como os termos difusivos cruzados. A integração destes termos em δV usando o teorema de Gauss, seguida de discretização, resulta em fluxos nas faces que, para a componente u_i da velocidade numa face transversal à coordenada curvilínea x_j , toma a forma:

$$\pm \left\{ \frac{\mu}{\delta V} \cdot \left[b_{ki} (\delta \tilde{u}_m)^k - \frac{2}{3} \delta_{im} b_{kn} (\delta \tilde{u}_n)^k \right] b_{jm} - \frac{2}{3 \delta V} \delta_{im} \bar{\rho} k b_{jm} \right\}. \quad (4.17)$$

O sinal + aplica-se na face do volume de controlo de menor valor da coordenada curvilínea x_i (faces w , s , b). Para a equação da componente da velocidade \tilde{u}_1 , este fluxo difusivo na face s teria a expressão:

$$+ \left\{ \left(\frac{\mu}{\delta V} \right) \cdot \left[b_{k1} (\delta \tilde{u}_m)^k b_{2m} - \frac{2}{3} b_{kn} (\delta \tilde{u}_n)^k b_{21} \right] - \frac{2}{3 \delta V} \bar{\rho} k b_{21} \right\}_s. \quad (4.18)$$

4.2.4 Discretização dos termos fonte e dos termos dependentes do tempo

O integral do termo fonte no volume de controlo é discretizado da forma seguinte:

$$\int_{\delta V_P} J \bar{s}_\phi dx_1 dx_2 dx_3 \simeq (\bar{s}_\phi)_P \cdot \delta V_P \quad (4.19)$$

Se o termo fonte depender de forma não linear da variável dependente da equação de transporte, $(\bar{s}_\phi)_P$ é linearizado em relação a esta variável, contribuindo para evitar a divergência no cálculo iterativo ([Patankar, 1980]).

No termo fonte da equação de transporte de k , $s_k = G - \bar{\rho}\varepsilon$, o termo de geração de turbulência, $G = -\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}$ é modelado pela hipótese de Boussinesq. Integrando este termo em δV_P e discretizando conduz à seguinte expressão ([Peric, 1985]):

$$\begin{aligned} G_P \cdot \delta V_P = \left(\frac{\mu_t}{\delta V}\right)_P \cdot \left\{ 2 \left[(\delta \tilde{u}_1)^1 b_{11} + (\delta \tilde{u}_1)^2 b_{21} + (\delta \tilde{u}_1)^3 b_{31} \right]^2 + \right. \\ 2 \left[(\delta \tilde{u}_2)^1 b_{12} + (\delta \tilde{u}_2)^2 b_{22} + (\delta \tilde{u}_2)^3 b_{32} \right]^2 + \\ 2 \left[(\delta \tilde{u}_3)^1 b_{13} + (\delta \tilde{u}_3)^2 b_{23} + (\delta \tilde{u}_3)^3 b_{33} \right]^2 + \\ \left[(\delta \tilde{u}_1)^1 b_{12} + (\delta \tilde{u}_1)^2 b_{22} + (\delta \tilde{u}_1)^3 b_{32} + (\delta \tilde{u}_2)^1 b_{11} + (\delta \tilde{u}_2)^2 b_{21} + (\delta \tilde{u}_2)^3 b_{31} \right]^2 + \\ \left[(\delta \tilde{u}_1)^1 b_{13} + (\delta \tilde{u}_1)^2 b_{23} + (\delta \tilde{u}_1)^3 b_{33} + (\delta \tilde{u}_3)^1 b_{11} + (\delta \tilde{u}_3)^2 b_{21} + (\delta \tilde{u}_3)^3 b_{31} \right]^2 + \\ \left. \left[(\delta \tilde{u}_2)^1 b_{13} + (\delta \tilde{u}_2)^2 b_{23} + (\delta \tilde{u}_2)^3 b_{33} + (\delta \tilde{u}_3)^1 b_{12} + (\delta \tilde{u}_3)^2 b_{22} + (\delta \tilde{u}_3)^3 b_{32} \right]^2 \right\}_P \quad (4.20) \end{aligned}$$

Os termos com parêntesis curvos da forma $(\delta \phi)^j$ designam incrementos da grandeza ϕ segundo a direcção x_j . Os expoentes afectando parêntesis rectos representam potências.

Os termos de pressão que constam na equação do momento linear não são integrados com uso do teorema de Gauss, mas directamente como termos fonte. Considerando a equação de transporte da componente da velocidade cartesiana \tilde{u}_1 ,

$$-\int_{\delta V} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \bar{p} \beta_{j1} \right) dx_1 dx_2 dx_3 \simeq -(\bar{p}_e - \bar{p}_w) b_{11P} - (\bar{p}_n - \bar{p}_s) b_{21P} - (\bar{p}_c - \bar{p}_b) b_{31P} \quad (4.21)$$

Os termos b_{j1} são calculados no nó P e não nas faces como sucederia com a aplicação do teorema de Gauss.

Os termos não estacionários são integrados da mesma forma que os termos fonte, sendo a derivada em ordem ao tempo aproximada por um quociente de diferenças finitas.

4.2.5 Discretização da equação de conservação da massa

Integrando os termos da equação de conservação da massa e efectuando a discretização, obtém-se uma equação discretizada que relaciona os fluxos de massa nas faces do volume de controlo:

$$\frac{\delta \bar{\rho}}{\delta t} \delta V_P + F_{1e} - F_{1w} + F_{2n} - F_{2s} + F_{3c} - F_{3b} = 0 . \quad (4.22)$$

Os índices w, e, s, n, b, c , referem-se às faces do volume de controlo.

4.2.6 Discretização das equações de transporte das variáveis escalares

A equação duma variável escalar (4.6) expandida tem a forma

$$\begin{aligned} J \frac{\partial \rho \tilde{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1} \left[U_1 \tilde{\phi} - \left(\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_1} B_{11} + \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_2} B_{12} + \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_3} B_{13} \right) \right] + \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \left[U_2 \tilde{\phi} - \left(\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_1} B_{21} + \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_2} B_{22} + \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_3} B_{23} \right) \right] + \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \left[U_3 \tilde{\phi} - \left(\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_1} B_{31} + \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_2} B_{32} + \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_3} B_{33} \right) \right] = J \cdot \bar{s}_{\tilde{\phi}} . \end{aligned} \quad (4.23)$$

A integração no volume δV_P é feita de acordo com as regras apresentadas nas subsecções anteriores. Desta integração resulta uma equação da forma

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \rho \tilde{\phi}}{\partial t} \right)_P \delta V_P + (I^C + I^D)_e - (I^C + I^D)_w + (I^C + I^D)_n - (I^C + I^D)_s + \\ (I^C + I^D)_c - (I^C + I^D)_b = (\bar{s}_{\tilde{\phi}})_P \cdot \delta V_P \end{aligned} \quad (4.24)$$

em que I^C e I^D são fluxos convectivos e difusivos de $\tilde{\phi}$ sobre as faces.

4.2.7 Discretização das equações de transporte das componentes da velocidade

Os termos de transporte convectivo e difusivo das componentes da velocidade que apresentam as mesmas formas que para o caso da variável ϕ são discretizados de forma análoga à das expressões (4.13) e (4.14).

Devido ao facto de terem geralmente ordens de grandeza inferiores aos restantes termos difusivos, os termos difusivos cruzados, assim como os termos incluindo os parâmetros ω_{ij} e a energia cinética turbulenta, são incluídos no termo fonte.

4.2.8 Cálculo das variáveis dependentes nas faces

Os fluxos convectivos são expressos em termos dos valores das variáveis dependentes nas faces, pelo que se torna necessária uma forma de determinar estes valores em função dos seus valores nos nós da malha. O método geralmente usado consiste na realização duma interpolação linear, que pode ser feita com recurso aos factores λ . Por exemplo para a face e ,

$$\phi_e = \phi_E \cdot \lambda_e + \phi_P \cdot (1 - \lambda_e) \quad (4.25)$$

em que λ_e é definido da forma seguinte:

$$\lambda_e = \frac{d_{eP}}{d_{EP}} \quad , \quad (4.26)$$

em que d_{eP} representa a distância entre a face e e o nó P e d_{EP} a distância entre os nós E e P .

Numa outra forma de interpolação que decorre da solução da equação de difusão estacionária sem termo fonte num sistema com simetria cilíndrica, o factor λ_e tem a expressão

$$\lambda_e = \frac{\ln r_e - \ln r_P}{\ln r_E - \ln r_P} \quad , \quad (4.27)$$

sendo r a coordenada radial. Esta expressão não pode ser usada sem alteração para valores de r nulos.

Os valores de λ calculados com o perfil logarítmico aproximam-se, com o aumento de r , dos calculados com o perfil linear.

4.2.9 Condições de fronteira

As equações de transporte discretizadas tal como a equação (4.24) são resolvidas em todos os volumes de controlo interiores do domínio de cálculo. Nas fronteiras, os fluxos das variáveis dependentes são expressos de forma diferente da forma apresentada para um volume de controlo interior.

Em fronteiras em que o escoamento entra no domínio de cálculo e os valores da velocidade e das variáveis escalares são conhecidos, são colocados nós na superfície de entrada coincidindo com as faces de entrada dos volumes de controlo de entrada. Os fluxos difusivos e convectivos nos volumes de controlo de entrada são calculados por intermédio

dos valores das variáveis nos nós da superfície de entrada. Nos casos em que os valores das variáveis dependentes não são conhecidos nas entradas, eles terão de ser estimados por intermédio de extrapolações ou por expressões empíricas. Os valores de k e ε podem ser estimados por

$$k = IU_0^2 \quad , \quad \varepsilon = \frac{k^{3/2}}{L} \quad , \quad (4.28)$$

em que I (intensidade da turbulência) e L são parâmetros ajustáveis e U_0 é a velocidade de entrada.

Nas fronteiras de saída do escoamento, os fluxos nas faces de saída são calculados segundo os procedimentos estabelecidos para os volumes de controlo interiores. Caso seja necessário estimar valores de variáveis sobre a superfície de saída, poderá proceder-se a extrapolação dos valores interiores.

Nas fronteiras constituídas por paredes impermeáveis, os fluxos convectivos são nulos e os fluxos difusivos dependem de gradientes normais à parede.

A pressão nas paredes pode determinar-se por extrapolação dos seus valores nos nós interiores.

No âmbito do método de cálculo e correcção de pressão e velocidade *SIMPLE*, a correcção da pressão p' é nula na fronteira sólida se o valor da pressão for especificado.

O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ na sua forma clássica só é válido para números de Reynolds elevados. Junto às paredes o número de Reynolds turbulento local

$$Re_t = \frac{\rho k^2}{\mu \varepsilon} \quad (4.29)$$

é baixo e os efeitos viscosos são importantes, pelo que se torna necessário abandonar os cálculos baseados no modelo $k - \varepsilon$ clássico. Em sua substituição usam-se perfis das variáveis, chamados funções de parede, que não são calculados pelas equações de transporte.

Supondo que, num escoamento estacionário junto à parede, o gradiente de pressão não varia com a distância à parede, e admitindo que o comprimento de mistura é proporcional à distância à parede, [Prandtl, 1925] determinou o seguinte perfil da velocidade:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) \quad , \quad (4.30)$$

em que $\kappa = 0.42$ é a constante de Von Karman e $E = 9.8$ é uma constante empírica, u^+ e

y^+ são definidos por

$$u^+ = \frac{\tilde{u}}{(\tau_f/\rho)^{1/2}} \quad \text{e} \quad y^+ = \frac{(\tau_f/\rho)^{1/2}}{\nu} y \quad (4.31)$$

em que

$$\tau_f = (\mu + \mu_t) \frac{d\tilde{u}_{par}}{dn} \quad (4.32)$$

é a tensão na parede, sendo \tilde{u}_{par} a projecção da velocidade paralelamente à parede e n a coordenada de espaço normal à parede.

Na zona próxima da parede em que o escoamento é laminar, o perfil da velocidade é $u^+ = y^+$. Igualando as duas expressões de u^+ , encontramos o valor de $y^+ = 11.2$, que pode assim considerar-se como zona de transição entre os regimes laminar e turbulento nas proximidades de uma parede.

Em regime estacionário, sendo desprezáveis os termos de transporte da energia cinética turbulenta, as taxas de produção e dissipação são iguais (equação 3.10). Nestas condições, as funções de parede para k e ε são ([Ferziger e Peric, 2002]):

$$k = \rho C_\mu^{-\frac{1}{2}} \tau_f \quad ; \quad \varepsilon = \frac{\tau_f^2}{\kappa \rho \mu y^+} . \quad (4.33)$$

Detalhes sobre a aplicação dos diversos tipos de condições de fronteira são apresentados por exemplo em [Versteeg e Malalasekera, 1995].

4.3 Método de solução

Nas equações (4.13) e (4.14), os valores de ϕ nas faces são expressos em termos dos valores de ϕ nos nós principais por meio de interpolações. Por substituição na equação (4.24), obtemos uma equação algébrica dependente dos valores de ϕ no nó P e nos nós vizinhos que pode ser explicitada em ϕ_P , assumindo a forma:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_B \phi_B + a_C \phi_C + b , \quad (4.34)$$

em que os coeficientes a_W , a_E , a_S , a_N , a_B e a_C dependem de parâmetros geométricos da malha, propriedades do fluido e componentes da velocidade. No regime estacionário em que estaremos interessados, b é o integral volúmico do termo fonte s_ϕ no volume de controlo. Nos casos em que o termo fonte é função de ϕ , convém linearizá-lo (ver [Patankar, 1980]):

$$b = S_\phi = S_C + S_P \phi_P . \quad (4.35)$$

Rearranjando esta equação de forma a que o coeficiente b inclua apenas o termo S_C , o coeficiente a_P tem a seguinte expressão:

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_C - S_P . \quad (4.36)$$

Nos problemas envolvendo escoamento de fluidos, as equações discretizadas não são lineares, sendo geralmente mais simples e rápido utilizar métodos de cálculo iterativos.

4.3.1 Cálculo do termo convectivo

No cálculo do fluxo convectivo intervêm os valores da variável dependente nas faces do volume de controlo. Estes valores têm de ser expressos em termos dos valores nos nós principais. Geralmente os perfis das variáveis dependentes não são lineares, pelo que os valores que assumem nas faces não são interpolações lineares dos seus valores nos nós principais. Dependem em particular da grandeza relativa dos fluxos difusivo e convectivo na face f ,

$$I_f^D = \pm \Gamma_f A_f \frac{\phi_P - \phi_F}{x_P - x_F} ; \quad I_f^C = (\rho u A)_f \phi_f = F_f \phi_f , \quad (4.37)$$

em que o índice f designa a face do volume de controlo entre os nós P e F . Os sinais $+$ e $-$ aplicam-se nos casos em que $x_P - x_F$ é positivo ou negativo, respectivamente.

O esquema de diferenças centrais, em que ϕ_f é calculado por interpolação linear dos dois nós vizinhos mais próximos, apresenta em certos casos problemas que conduzem a instabilidade nos cálculos. Uma solução encontrada que permite a estabilidade do cálculo (condicionada ao valor de u) é o esquema *upwind* de [Courant *et al.*, 1952], em que à variável ϕ_f é atribuído o valor ϕ do nó a montante.

No caso simplificado dum escoamento unidimensional estacionário sem termo fonte, sendo uniformes as propriedades do fluido, o perfil da variável ϕ entre dois nós da malha, por exemplo P e E é dado por

$$\phi = C + B \cdot \exp \left[\frac{\rho u}{\Gamma_\phi} (y - y_P) \right] \quad (4.38)$$

em que C e B são constantes que dependem de ϕ_P e ϕ_E .

O perfil será linear apenas quando

$$Pe \equiv \frac{\rho u}{(\Gamma_\phi / \delta y)} = 0 . \quad (4.39)$$

em que Pe é o número de Peclet do escoamento. O valor de ϕ nas faces do volume de controlo deve assim ser calculado por um esquema de interpolação apropriado que assegure que o fluxo convectivo tenha valores próximos dos exactos. O fluxo difusivo não requer nestas condições qualquer tratamento especial, sendo determinado por uma aproximação linear de $\partial\phi/\partial y$, com eventual interpolação não linear do coeficiente difusivo Γ_ϕ .

Entre os vários esquemas de interpolação possíveis ([Patankar, 1980]), o esquema híbrido tem uma forma simples e assegura um perfil próximo do exacto unidimensional com um baixo custo em termos de tempo de cálculo. Este esquema de discretização, que é uma composição dos esquemas de diferenças centrais e *upwind*, conduz aos seguintes coeficientes da equação (4.34):

$$\begin{aligned} a_W &= D_w M(|Pe_w|) + \max(F_w, 0) \\ a_E &= D_e M(|Pe_e|) + \max(F_e, 0) \\ a_S &= D_s M(|Pe_s|) + \max(F_s, 0) \\ a_N &= D_n M(|Pe_n|) + \max(F_n, 0) \\ a_B &= D_b M(|Pe_b|) + \max(F_b, 0) \\ a_C &= D_c M(|Pe_c|) + \max(F_c, 0) \end{aligned} \quad (4.40)$$

em que

$$M(|Pe|) = \max[0, (1 - |Pe|/2)] ; \quad Pe = \frac{F}{D} ; \quad D = \frac{\Gamma_\phi \cdot A}{\delta y} \quad (4.41)$$

e os fluxos de massa F são calculados pela equação (4.11).

O esquema híbrido resulta num perfil das variáveis dependentes próximo dos perfis exactos, dentro dos pressupostos admitidos. Em escoamentos multidimensionais, com propriedades não uniformes (como sucede particularmente na combustão), os perfis das variáveis implícitos neste esquema poderão conduzir a erros significativos.

Nos locais em que o vector velocidade é oblíquo em relação às superfícies de coordenadas constantes da malha, o esquema híbrido produz difusão numérica, isto é, introduz um excesso de transporte perpendicular às isolinhas da velocidade, mesmo nos casos em que o coeficiente de difusão é nulo.

Vários esquemas de ordem superior (por exemplo, ver referências em [Darwish e Moukalled, 1994]) têm uma maior precisão, mas frequentemente introduzem oscilações nos casos em que são elevados os gradientes das propriedades e o número

de Peclet. Vários métodos desenvolvidos para evitar este problema são referidos em [Darwish e Moukalled, 1994].

[Leonard, 1988] generalizou o tratamento de métodos de ordem elevada por intermédio da introdução de variáveis normalizadas. Na determinação do valor de ϕ na face f , são considerados dois nós a montante da face e um a jusante. As variáveis dependentes e independentes normalizadas são definidas pelas equações

$$\hat{\phi} = \frac{\phi - \phi_+}{\phi_- - \phi_+} \quad ; \quad \hat{x} = \frac{x - x_+}{x_- - x_+} . \quad (4.42)$$

O índice $+$ refere-se ao nó mais a montante no escoamento e o índice $-$ ao nó a jusante, enquanto o índice C se refere ao nó intermédio. Usando coordenadas curvilíneas, as variáveis x_+ , x_C e x_- podem ser consideradas como as distâncias ao nó localizado em x_+ .

Um dos esquemas que pode ser expresso em termos de variáveis normalizadas é o esquema *MUSCL* (de "Monotone Upstream-centered Schemes for Convection Law", [Van Leer, 1977]). Neste esquema, os valores das variáveis normalizadas nas faces são calculados a partir das expressões:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_f &= \frac{2\hat{x}_f - \hat{x}_C}{\hat{x}_C} \hat{\phi}_C & \text{se} & \quad 0 < \hat{\phi}_C < \frac{\hat{x}_C}{2} \\ \hat{\phi}_f &= \hat{x}_f - \hat{x}_C + \hat{\phi}_C & \text{se} & \quad \frac{\hat{x}_C}{2} < \hat{\phi}_C < 1 + \hat{x}_C - \hat{x}_f \\ \hat{\phi}_f &= 1 & \text{se} & \quad 1 + \hat{x}_C - \hat{x}_f < \hat{\phi}_C < 1 \\ \hat{\phi}_f &= \hat{\phi}_C & \text{nos casos restantes} & \end{aligned} \quad (4.43)$$

Para aplicação deste esquema em programas numéricos que usam originalmente outros esquemas de interpolação (como por exemplo o híbrido), usa-se o procedimento de correcção diferida ([Rubin e Khosla, 1982]). Neste procedimento, o fluxo convectivo calculado com um esquema de ordem baixa é substituído pelo fluxo calculado por um esquema de alta resolução.

Na equação (4.24) utilizando um esquema B de baixa resolução, os termos convectivos têm a expressão $F_f \phi_f^B$. Num esquema A de alta resolução, estes termos têm a expressão $F_f \phi_f^A$. Mantendo o primeiro membro inalterado, introduz-se a correcção diferida como termo fonte adicional constituída por um somatório de termos da forma $F_f(\phi_f^B - \phi_f^A)$. Num caso unidimensional estacionário, a equação (4.24) assume a forma

$$(I^C + I^D)_e - (I^C + I^D)_w = S. \quad (4.44)$$

Substituindo os fluxos convectivos pelas suas expressões obtidas da equação (4.37), e introduzindo as correcções $F(\phi^B - \phi^A)$ dos fluxos convectivos, obtém-se

$$(I^C + I^D)_e - (I^C + I^D)_w = S + F_e(\phi_e^B - \phi_e^A) - F_w(\phi_w^B - \phi_w^A). \quad (4.45)$$

Esta equação pode tomar uma forma análoga à da equação (4.34), em que a correcção dos fluxos convectivos é calculada de forma explícita.

4.3.2 Método *SIMPLE* de solução das equações discretizadas

As equações de conservação do momento linear discretizadas permitem o cálculo das componentes da velocidade, supondo conhecidos os termos fonte, incluindo o gradiente de pressão. O termo de pressão discretizado pela equação (4.21) inclui valores localizados exclusivamente nas faces do volume de controlo. Estes valores, se calculados por interpolação dos seus valores nos nós da malha conduzem a uma equação de u_iP que não depende do valor de p no nó P , mas apenas nos nós vizinhos. O cálculo de u_i num nó de índice par depende apenas dos valores da pressão nos índices ímpares. Um campo de pressões em que se adicionasse uma constante aos valores de p com índice par (por exemplo) resultaria em valores das componentes da velocidade inalteradas. Ou seja, é possível que a evolução de um cálculo iterativo conduza a um campo de pressões irrealista e a campos de velocidade realistas. Este facto pode ter consequências nas condições de fronteira assim como nas propriedades dependentes da pressão. Um método para evitar este problema foi proposto por [Harlow e Welch, 1965] e consiste na adopção de malhas para as componentes da velocidade desfasadas em relação à malha das variáveis escalares. Os gradientes da pressão passam a ser calculados a partir de valores da pressão em nós adjacentes ao nó da componente da velocidade. Nos casos em que a discretização é efectuada numa malha única, como no caso presente, o problema pode ser resolvido evitando interpolações lineares para o cálculo da pressão nas faces dos volumes de controlo, como se descreve nesta secção ([Rhie, 1981], [Peric, 1985]).

O cálculo da pressão pode ser efectuado por diversos métodos, por exemplo *SIMPLE* ([Patankar e Spalding, 1972]), *SIMPLER* ([Patankar, 1980]), *SIMPLEC* ([Van Doormal e Raithby, 1984]) e *PISO* ([Issa, 1986]).

Não existe no sistema de equações do escoamento considerado uma equação em que a pressão conste de uma forma explícita, com a excepção das equações utilizadas para

o cálculo das componentes da velocidade. No entanto, a equação de conservação da massa surge como uma equação dependendo exclusivamente das componentes da velocidade. Esta equação condiciona por isso os valores dos termos que nas equações do momento linear não dependem da velocidade, como é o caso do gradiente da pressão.

A substituição de expressões das componentes da velocidade (obtidas por intermédio das equações do momento linear discretizadas) na equação de conservação da massa conduz a uma equação que inclui a variável pressão nas faces do volume de controlo. Existe por intermédio desta equação um acoplamento entre as componentes da velocidade nos nós da malha e os valores da pressão definidos nas faces.

A equação de transporte discretizada da componente u_i da velocidade tem uma forma análoga à da equação (4.34) em que se substitui ϕ por u_i e, no termo fonte, se inclui o termo (4.17) e explicita o termo de pressão discretizado de acordo com a equação (4.21). A equação discretizada de u_i pode então assumir uma forma análoga à da equação (4.34). Separando o termo de pressão do termo fonte, u_{iP} pode ser calculada por intermédio da expressão:

$$u_{iP} = H_P(u_{im}) + (Q_{ji})_P(\delta p)_P^j + C'_{iP} \quad (4.46)$$

em que

$$H_P(u_{im}) = \frac{\sum_m a_m u_{im}}{a_P} \quad \text{e} \quad Q_{ji} = -\frac{b_{ji}}{a_P} \quad (4.47)$$

e C'_{iP} é o termo fonte da equação de transporte de u_i excluindo o termo de pressão.

A equação (4.22) depende dos valores das componentes u_i nas faces do volume de controlo, que podem ser calculadas fazendo uma média linear dos valores de u_i entre nós adjacentes. Por exemplo para a face e ,

$$u_{ie} = H_e(u_{im}) + (Q_{1i})_e(p_E - p_P) + (Q_{2i})_e(p_{ne} - p_{se}) + (Q_{3i})_e(p_{ce} - p_{be}) + C'_{ie} \quad (4.48)$$

em que as grandezas com índice e são determinadas pelas médias nos nós P e E e termos como p_{ne} são determinados pela média de p nos quatro nós mais próximos do vértice ne . Pelo facto de p e C'_i não serem em geral funções lineares de u_i faz com que esta média não seja uma média linear em u_i .

A substituição das expressões (4.48) das componentes da velocidade nas faces na equação (4.22) conduz a uma equação de conservação da massa expressa em termos da

pressão. Esta equação tem a mesma forma que a equação genérica (4.34) com p como variável dependente.

No método de solução *SIMPLE* ("Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations" de [Patankar e Spalding, 1972]), as variáveis u_i e p são decompostas nos seus valores estimados, identificados com uma asterisco, e em parcelas de correcção, identificadas com uma plica:

$$\begin{aligned} u_i &= u_i^* + u_i' \\ p &= p^* + p' \end{aligned} \quad (4.49)$$

Subtraindo da equação (4.46) a sua homóloga para a velocidade e pressão estimadas, obtém-se uma expressão para a correcção das componentes da velocidade u_i' :

$$u_{iP}' = (Q_{ji}\delta p_j')_P \quad (4.50)$$

em que, de acordo com o algoritmo *SIMPLE*, se desprezou o termo $H_P(u_{im}) - H_P(u_{im}^*) = H_P(u_{im}')$.

Na face f , a correcção da componente i da velocidade tem a expressão

$$u_{if}' = (Q_{ji}\delta p_j')_f \quad (4.51)$$

Decompondo os fluxos de massa de forma análoga à efectuada para u_i , obtemos uma equação de conservação da massa discretizada, onde surgem explicitamente os valores da correcção da pressão p' nos nós P e seus vizinhos:

$$a_P p_P' = a_W p_W' + a_E p_E' + a_S p_S' + a_N p_N' + a_B p_B' + a_C p_C' + C_P \quad (4.52)$$

Optando por introduzir todas as diferenças "cruzadas" de p' no termo fonte, os coeficientes da equação (4.52) têm as expressões:

$$\begin{aligned} a_W &= \rho_W (b_{11}Q_{11} + b_{12}Q_{12} + b_{13}Q_{13})_w \\ a_E &= \rho_E (b_{11}Q_{11} + b_{12}Q_{12} + b_{13}Q_{13})_e \\ a_S &= \rho_S (b_{21}Q_{21} + b_{22}Q_{22} + b_{23}Q_{23})_s \\ a_N &= \rho_N (b_{21}Q_{21} + b_{22}Q_{22} + b_{23}Q_{23})_n \\ a_B &= \rho_B (b_{31}Q_{31} + b_{32}Q_{32} + b_{33}Q_{33})_b \\ a_C &= \rho_C (b_{31}Q_{31} + b_{32}Q_{32} + b_{33}Q_{33})_c \end{aligned} \quad (4.53)$$

A resolução das equações (4.52) e (4.50) permite obter u'_i e p' , que são usados para corrigir iterativamente os campos de velocidade e pressão.

4.3.3 Relaxação

A solução iterativa de sistemas de equações de transporte da forma (4.34) pode conduzir a divergência. A divergência pode geralmente ser evitada recorrendo ao amortecimento dos resultados obtidos. A equação (4.34) pode tomar uma forma do tipo

$$\phi_P = f(X) , \quad (4.54)$$

em que X representa o conjunto de variáveis e parâmetros incluídos no cálculo de ϕ_P . Uma forma de obter a relaxação do cálculo consiste em reavaliar o valor de ϕ_P por intermédio de

$$\phi_P = (1 - rel) \cdot \phi_P^0 + rel \cdot f(X) \quad (4.55)$$

em que ϕ_P^0 é o valor de ϕ_P na iteração anterior e $rel(\in]0, 1])$ é um parâmetro de relaxação a escolher de forma a evitar divergência tentando manter uma aproximação rápida da convergência.

No caso das equações (4.49), a correcção à velocidade não sofre relaxação ([Patankar, 1980]), enquanto a correcção da pressão é relaxada pela expressão

$$p = p^* + rel_p \cdot p' . \quad (4.56)$$

4.3.4 Critério de convergência

Entre vários critérios de convergência do processo iterativo, encontram-se os critérios que se baseiam na medida da precisão com que as equações de transporte são satisfeitas. A equação (4.24) ou a sua equivalente (4.34) reflectem o facto de que a acumulação de uma grandeza num volume de controlo é o resultado dos fluxos nas faces e da criação ou destruição dessa grandeza no mesmo volume. Num cálculo exacto, o resíduo

$$R = -a_P \phi_P + (a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_B \phi_B + a_C \phi_C) + b \quad (4.57)$$

deveria ter um valor nulo em todos os volumes de controlo. Um critério de convergência consiste em avaliar a soma dos módulos dos resíduos em todos os N volumes de controlo

no domínio de cálculo, normalizado por um fluxo I representativo da grandeza em questão

$$Q_\phi = \frac{\sum_{n=1}^N |R_n|}{|I|} \quad (4.58)$$

e declarar a satisfação em relação à convergência do cálculo quando Q_ϕ for inferior a um certo valor $Q_{\phi_{\max}}$, para cada variável ϕ .

4.3.5 Método de cálculo iterativo

O cálculo do transporte de uma grandeza baseia-se na solução de um sistema de equações acopladas do tipo da equação (4.34).

O método mais simples de solução iterativa deste sistema de equações é o método de Gauss-Seidel que percorre sequencialmente todos os nós da malha do domínio e efectua o cálculo com os valores disponíveis das variáveis, parte já calculada na iteração actual e parte na iteração anterior. É este o método adoptado neste trabalho. No método *ADI* ("Alternating-Direction Implicit", [Peaceman e Rachford, 1955]), aplicável a sistemas de equações não estacionárias, o sistema de equações de transporte de uma variável é decomposto numa sucessão de problemas unidimensionais. Um algoritmo que resolve numa única iteração um sistema de equações lineares unidimensionais é o *TDMA* ("Tri-Diagonal Matrix Algorithm", [Thomas, 1949]) que pode ser útil quando conjugado com alguns métodos iterativos. Uma variedade de outros métodos consta em [Ferziger e Peric, 2002].

4.3.6 Método de solução

A simulação de uma câmara de combustão envolve, de acordo com os modelos físicos e químicos utilizados e dos métodos numéricos escolhidos, um conjunto de operações que pode ser resumido da forma seguinte:

Cálculos preliminares:

1. Elaboração de uma malha ajustada à geometria da câmara de combustão.
2. Cálculo dos valores instantâneos das fracções mássicas em função da fracção

de mistura e da taxa de dissipação escalar.

3. Definição de valores iniciais das variáveis e de parâmetros fixos do cálculo.

Cálculos iterativos:

1. Resolução das equações de transporte das variáveis médias:

- a. Componentes cartesianas da velocidade..
 - b. Correção da pressão.
 - c. Energia cinética turbulenta.
 - d. Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.
 - e. Fração de mistura.
 - f. Variância da fração de mistura.
 - g. Entalpia.
2. Correções da pressão e velocidade.
 3. Frações mássicas médias a partir da fração de mistura e da sua variância, taxa de dissipação escalar e frações mássicas instantâneas.
 4. Temperatura a partir da entalpia e frações mássicas.
 5. Propriedades da mistura tais como: massa volúmica, viscosidades laminar e turbulenta, calor específico, potência radiativa.

Cálculos finais:

1. Determinação de parâmetros e variáveis não utilizados na simulação, destinados à apresentação de resultados tais como: frações molares, vorticidade, função corrente.

Capítulo 5

Simulação de escoamentos sem reacção química

Neste capítulo, os modelos e métodos apresentados nos capítulos anteriores são utilizados na simulação de vários escoamentos sem reacção química. Os escoamentos escolhidos, para os quais existem dados experimentais ou numéricos publicados, apresentam características diversas, de forma a que os modelos introduzidos nos códigos possam ser testados em condições variadas. Os códigos são testados em diversas situações: com diferentes valores do número de Reynolds em regime laminar e turbulento; em escoamentos forçados por pressão e por tensões viscosas; em domínios com paredes planas com diversos ângulos entre as paredes, assim como com paredes curvilíneas; em escoamentos com recirculação; em domínios de geometria cilíndrica com rotação do fluido em torno do eixo de simetria (*swirl*).

O balanço das variáveis do escoamento é feito por intermédio de equações diferenciais expressas em coordenadas curvilíneas, utilizando componentes cartesianas da velocidade (ver capítulo 2 e secção 4.1). As equações de transporte diferenciais são discretizadas por integração nos volumes de controlo que em conjunto constituem o domínio de cálculo (método dos volumes finitos, secção 4.2). Em cada volume de controlo, as diversas variáveis dependentes são representadas num único nó, evitando a necessidade de malhas desviadas. As coordenadas usadas na construção das malhas podem ser ortogonais ou não ortogonais, rectilíneas ou curvilíneas. Os fluxos convectivos são introduzidos nas

equações discretizadas usando o esquema híbrido de discretização ou o esquema *MUSCL* com correcção diferida ao esquema *upwind* (subsecção 4.3.1). O cálculo da pressão é efectuado com utilização do algoritmo *SIMPLE* (subsecção 4.3.2). O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ é usado nas suas versões clássica e *RNG* (secção 3.1).

Em todos os casos as simulações efectuadas utilizam domínios de cálculo bidimensionais.

5.1 Escoamento laminar numa geometria complexa

5.1.1 O caso em estudo

Com o objectivo de testar diferentes algoritmos de solução de equações diferenciais às derivadas parciais, a International Association for Hydraulic Research promoveu o seu 5º encontro em Roma, 1982. Os grupos de investigação participantes apresentaram os resultados de simulações de escoamentos laminares numa geometria complexa. Os resultados do encontro são relatados e comparados em [Napolitano e Orlandi, 1985]. Um dos grupos efectuou testes com refinamento de malhas e encontrou resultados independentes da malha, pelo que estes resultados foram usados como termo de comparação.

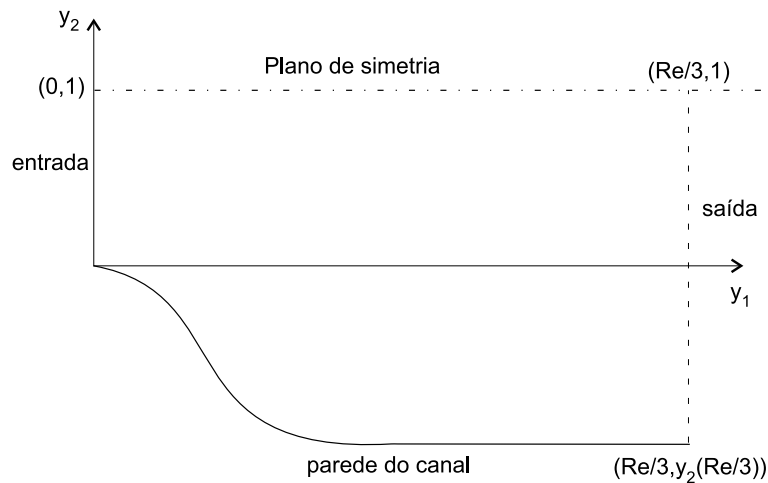


Figura 5.1: Geometria do canal difusor para o escoamento descrito em [Napolitano e Orlandi, 1985].

Os escoamentos considerados, com números de Reynolds $Re = 10$ e $Re = 100$,

ocorrem em canais bidimensionais com expansões graduais. No presente trabalho apenas o escoamento com $Re = 10$ é simulado.

A parede inferior do canal está localizada sobre a superfície $y_2(y_1)$ definida por

$$y_2(y_1) = \frac{1}{2} [\tanh(2 - 30y_1/Re) - \tanh(2)] . \quad (5.1)$$

e está representada na figura 5.1 para o caso em que $Re = 10$. Para definição do número de Reynolds, considerou-se a velocidade média na entrada e metade da largura desta.

As componentes da velocidade na entrada correspondem a um escoamento de Poiseuille completamente desenvolvido e têm as expressões

$$\begin{aligned} u(0, y_2) &= 3 \left(y_2 - \frac{y_2^2}{2} \right) \\ v(0, y_2) &= 0 . \end{aligned} \quad (5.2)$$

Na parede, os fluxos de massa são nulos assim como as componentes da velocidade. No plano de simetria as condições de fronteira são de simetria e as condições de fronteira na saída do canal são escolhidas livremente pelos participantes. A pressão na parede é imposta com um valor $p(y_1 = Re/6) = 0$.

Os resultados pretendidos são os valores da vorticidade e da pressão na parede do canal.

A malha aplicada deve ter 21×21 nós.

5.1.2 Modelo utilizado e comparação de resultados

Na equação de conservação do momento linear, podemos utilizar as variáveis normalizadas

$$\begin{aligned} \hat{u} &= \frac{u}{U_0} \\ \hat{y}_i &= \frac{y_i}{L} \\ \hat{p} &= \frac{p}{\rho U_0^2} , \end{aligned} \quad (5.3)$$

em que U_0 e L são valores de referência da velocidade e comprimento. Efectuando as substituições, a equação do momento exprime-se em termos das variáveis adimensionais, sendo o termo difusivo afectado pelo factor $\frac{\mu}{\rho U_0 L} = 1/Re$, a que se atribuem os valores

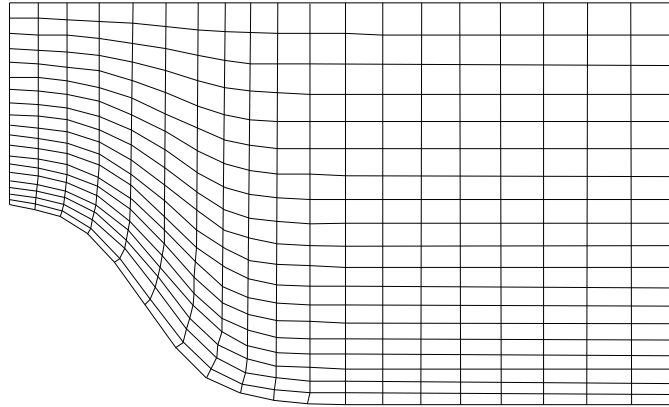


Figura 5.2: Malha para simulação do escoamento de [Napolitano e Orlandi, 1985]

correspondentes ao número de Reynolds do escoamento. Em alternativa, e dado que a velocidade média da entrada assim como a largura de referência são unitárias, podemos estabelecer os valores dos parâmetros da equação do momento de modo a reproduzir o valor de Re desejado. Para $Re = 10$, estabelecemos $\rho = 1$ e $\mu = 0.1$. Foi este o método adoptado em conjunto com equações dimensionais.

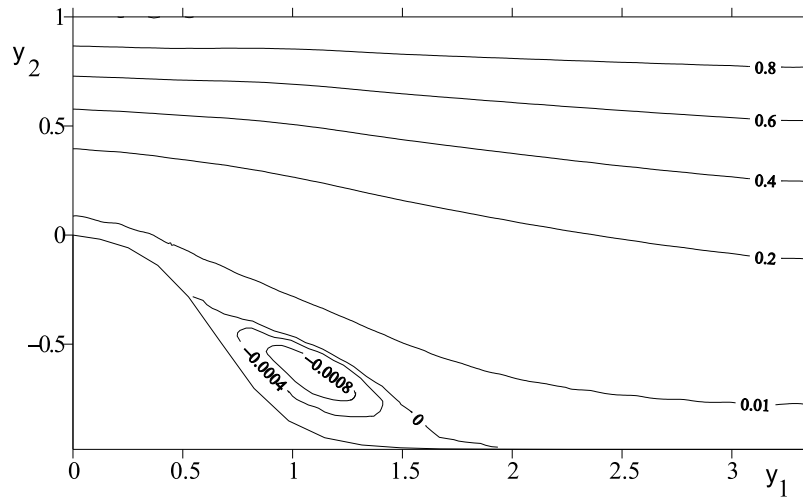


Figura 5.3: Linhas de corrente calculadas para o escoamento de [Napolitano e Orlandi, 1985] com $Re = 10$.

O cálculo da pressão nas faces dos volumes de controlo na saída foi efectuado por extrapolação linear dos valores da pressão nos nós a montante, o que conduz a resultados praticamente coincidentes com os resultados obtidos utilizando gradiente nulo.

A malha utilizada tem uma forma análoga à representada na figura 5.2. Esta apresenta um menor número de nós para facilitar a visualização. É uma malha curvilínea não ortogonal, em que se optou pela imposição de faces dos volumes de controlo perpendiculares às fronteiras.

Na discretização do termo convectivo foram usados o esquema híbrido e o esquema *MUSCL* com correcção diferida.

As isolinhas da função corrente determinadas pelas simulações efectuadas apresentam a forma representada na figura 5.3. O escoamento tem uma zona de separação entre os valores de $y_1 = 0.6$ e $y_1 = 1.8$, aproximadamente. Como refere [Napolitano e Orlandi, 1985], um pequeno desvio nas posições de separação e de recolamento da linha de corrente pode conduzir a erros relativos apreciáveis da vorticidade ω .

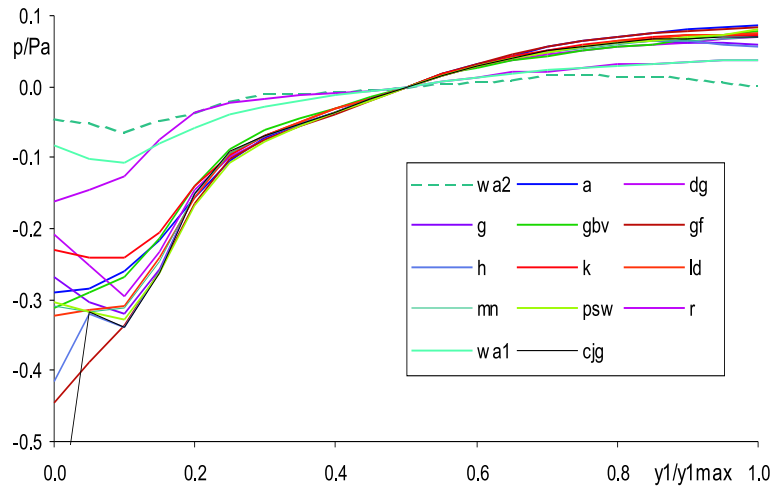


Figura 5.4: Distribuições de pressão na parede calculadas nas quinze simulações de [Napolitano e Orlandi, 1985], para $Re = 10$.

Para comparação com os resultados publicados, foram determinados os perfis da pressão e vorticidade sobre a parede. Pelas equações (4.1), (4.4), (4.5), (4.9) e os dados

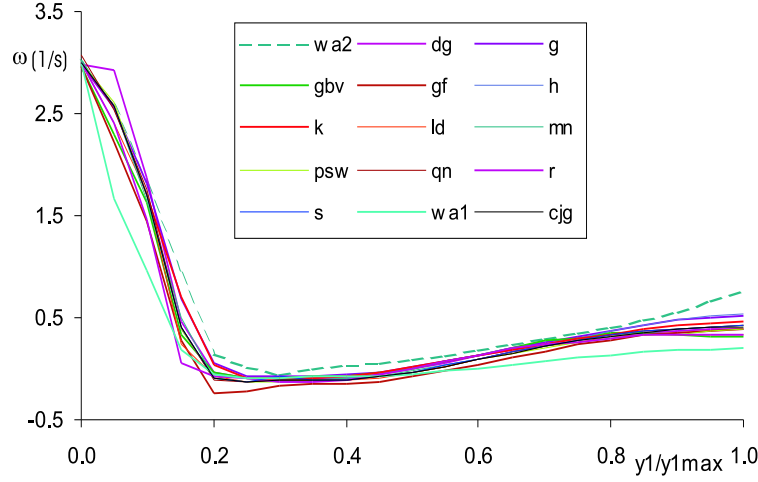


Figura 5.5: Distribuições da vorticidade ω na parede calculadas nas quinze simulações de [Napolitano e Orlandi, 1985], para $Re = 10$.

da tabela 4.1, a expressão discretizada da vorticidade é a seguinte:

$$\omega = \left(\frac{\partial u_2}{\partial y_1} - \frac{\partial u_1}{\partial y_2} \right)_P = \frac{1}{\delta V_P} [(y_{1n} - y_{1s})(u_{1e} - u_{1w}) - (y_{1e} - y_{1w})(u_{1n} - u_{1s}) + (y_{2n} - y_{2s})(u_{2e} - u_{2w}) - (y_{2e} - y_{2w})(u_{2n} - u_{2s})] . \quad (5.4)$$

Os resultados publicados em [Napolitano e Orlandi, 1985] são apresentados nas figuras 5.4 e 5.5. As siglas, identificadas em [Napolitano e Orlandi, 1985], correspondem aos diversos participantes no estudo comparativo referido. Os resultados considerados padrão são identificados com a sigla *CJG*.

Os resultados das simulações efectuadas neste trabalho são apresentados nas figuras 5.6 e 5.7 em comparação com os dados que em [Napolitano e Orlandi, 1985] foram considerados resultados padrão.

Os resultados obtidos com os esquemas híbrido e *MUSCL* são praticamente coincidentes com os resultados padrão com excepção da parede na proximidade da entrada. Tal poderá dever-se a eventuais diferenças nas condições de fronteira utilizadas no presente trabalho e nas simulações que conduziram aos resultados padrão. Na zona de entrada, em que são elevados os gradientes da velocidade e da pressão, [Napolitano e Orlandi, 1985] referem as discrepâncias que advêm da utilização de diferentes condições de fronteira na

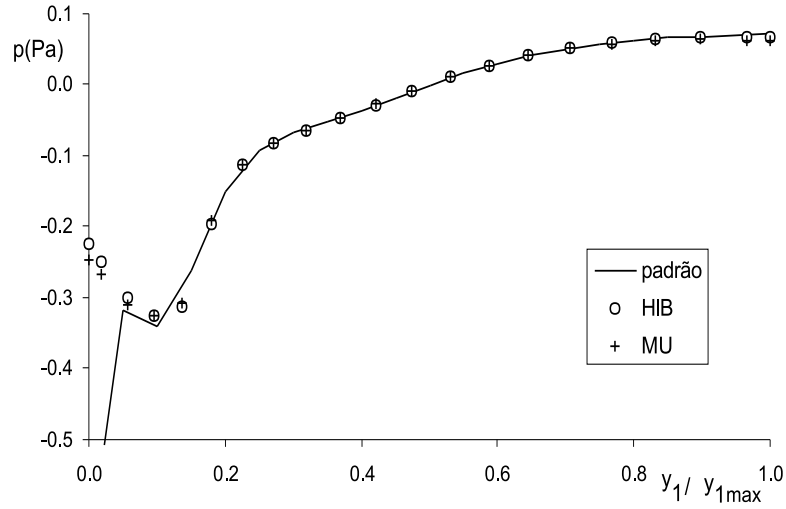


Figura 5.6: Distribuições da pressão na parede, para $Re = 10$. Os resultados usando os esquemas híbrido e MUSCL são comparados com as soluções padrão.

entrada do canal, não indicando quais as condições utilizadas nos resultados padrão.

<i>caso</i>	HIB	MU	P(cjg)	<i>a</i>	<i>dg</i>	<i>g</i>	<i>gbv</i>	<i>gf</i>	<i>h</i>
ε_p	3.68	3.40	0	10.67	8.11	2.63	11.15	10.72	2.24
ε_ω	5.42	5.95	0	—	26.51	52.12	34.92	48.98	9.22

<i>caso</i>	<i>k</i>	<i>ld</i>	<i>mn</i>	<i>psw</i>	<i>qn</i>	<i>r</i>	<i>s</i>	<i>wa2</i>	<i>wa1</i>
ε_p	8.24	4.81	3.44	4.97	—	61.25	—	78.92	58.56
ε_ω	41.21	10.75	6.70	6.30	2.63	30.14	1.74	111.92	55.04

Tabela 5.1 Valores de ε_p e ε_ω para várias simulações. *HIB*, *MU* e *P* referem-se respectivamente às simulações do presente trabalho com os esquemas híbrido e *MUSCL*, e às soluções padrão. As siglas restantes identificam os resultados das simulações apresentadas em [Napolitano e Orlandi, 1985].

Os parâmetros utilizados em [Napolitano e Orlandi, 1985] para aferição da qualidade dos resultados são os valores percentuais dos erros relativos médios definidos por:

$$\varepsilon_\omega = \frac{100}{19} \sum_{i=2}^{20} \left| \frac{\omega_i - \omega_{i0}}{\omega_{i0}} \right| \quad (5.5)$$

$$\varepsilon_p = \frac{100}{18} \sum_{i=2}^{20} \left| \frac{p_i - p_{i0}}{p_{i0}} \right| \quad (5.6)$$

em que ω_{i0} e p_{i0} são os resultados padrão para estes escoamentos. No cálculo de ε_p , o valor nulo $p(y_1 = Re/6)$ foi excluído do somatório. Para calcular os parâmetros ε_p e ε_ω ,

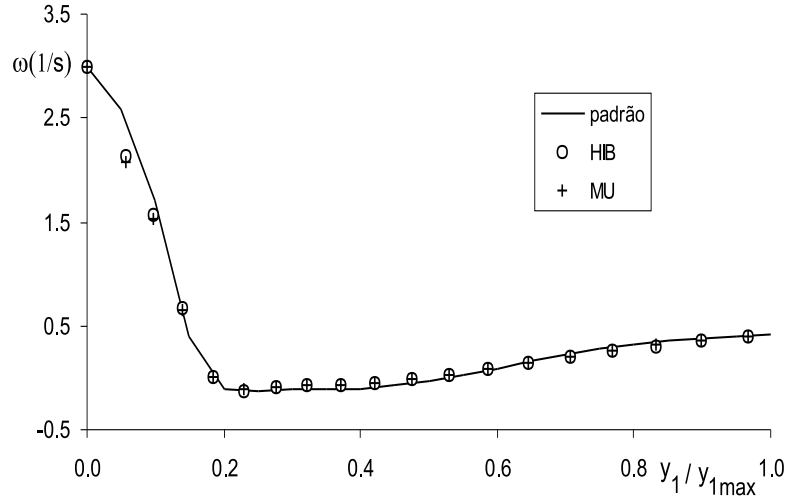


Figura 5.7: Distribuições de vorticidade na parede, para $Re = 10$.

os valores de p e ω calculados foram sujeitos a interpolação linear para obter os valores correspondentes às coordenadas y_1 presentes nas tabelas de [Napolitano e Orlandi, 1985].

Para o escoamento com $Re = 10$ com utilização do esquema híbrido, os valores para os erros são $\varepsilon_p = 3.68$ e $\varepsilon_\omega = 5.42$, enquanto com o esquema *MUSCL* são $\varepsilon_p = 3.40$ e $\varepsilon_\omega = 5.95$.

Este nível de erros compara-se de forma positiva com os níveis apresentados na tabela 5.1, pelo que o programa desenvolvido parece resolver com boa precisão a simulação de escoamentos laminares mantidos por gradientes de pressão.

5.2 Escoamento laminar em cavidade com parede em movimento tangencial

5.2.1 O caso em estudo

[Demirdzic *et al.*, 1992] propuseram problemas de escoamentos laminares incompressíveis para teste de simulações em malhas não ortogonais e apresentaram soluções padrão. [Oosterlee *et al.*, 1993] apresentam resultados de simulações dos mesmos escoamentos e soluções padrão, pelo que podem servir para testar programas numéricos aplica-

dos à simulação dos referidos escoamentos.

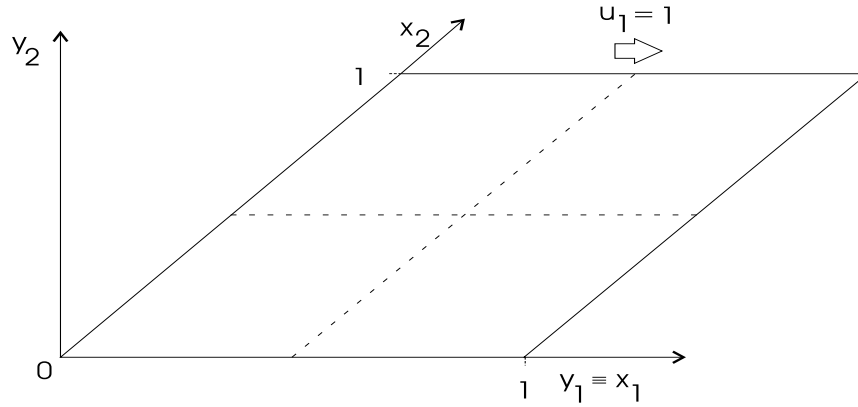


Figura 5.8: Geometria do domínio paralelogramático do escoamento de [Oosterlee *et al.*, 1993], indicando a parede em deslizamento.

Um dos problemas consiste no estudo do escoamento laminar numa cavidade com a forma de um paralelogramo de lado unitário e um ângulo interno de 45° (figura 5.8). O escoamento é forçado pelo deslizamento da face superior com velocidade unitária. O número de Reynolds, definido em termos do lado do paralelogramo e da velocidade referida, tem valores $Re = 100$ e $Re = 1000$. As fronteiras são consideradas impermeáveis e a velocidade contínua inclusive junto às paredes, com a exclusão das intersecções da parede móvel com as paredes adjacentes.

Nas simulações efectuadas por [Oosterlee *et al.*, 1993] são usadas velocidades contravariantes e coordenadas gerais nas equações de transporte. O domínio original é transformado num domínio rectangular e as equações são discretizadas pelo método dos volumes finitos em malhas desviadas uniformes neste domínio. Os fluxos convectivos nas faces são calculados pelo esquema híbrido usando o método SCAL ([Thompson e Ferziger, 1989]) para efectuar a transição suave entre diferenças centrais e *upwind*.

5.2.2 Modelo utilizado e comparação de resultados

A discretização das diversas variáveis dependentes é efectuada em malhas não desviadas, usando o algoritmo *SIMPLE* de cálculo de pressão e os esquemas híbrido e *MUSCL* com correcção diferida para cálculo do fluxo convectivo. As malhas usadas (figura

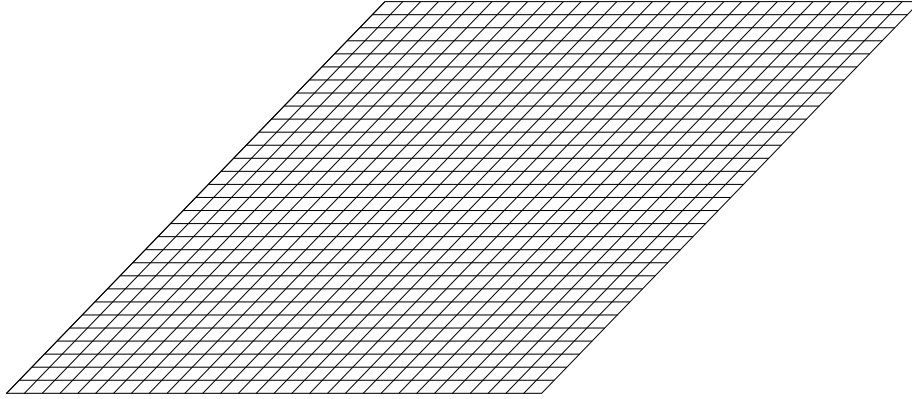


Figura 5.9: Malha com 32×32 nós para simulação do escoamento de [Oosterlee *et al.*, 1993].

5.9) apresentam números de nós 32×32 , 64×64 , 128×128 e 256×256 .

A função de corrente, com unidades m^2/s , é definida por intermédio de

$$u_1 = \frac{\partial \Psi}{\partial y_2}; \quad u_2 = -\frac{\partial \Psi}{\partial y_1} \quad (5.7)$$

e calculada a partir do campo de velocidades do escoamento. Os valores mínimo e máximo da função corrente, assim como as suas posições, são comparados com os homólogos de [Oosterlee *et al.*, 1993] na tabela 5.2.

HIB, *MU* e *Oos* referem-se respectivamente aos resultados usando o esquema híbrido, *MUSCL* e os publicados em [Oosterlee *et al.*, 1993] usando uma malha de 256×256 nós. ε é uma medida do erro definida por

$$\varepsilon = \left| \frac{\Psi - \Psi_{Oos256}}{\Psi_{Oos256}} \right| \cdot 100, \quad (5.8)$$

e corresponde ao erro relativo percentual dos valores extremos de Ψ entre as simulações efectuadas no presente trabalho e a simulação de [Oosterlee *et al.*, 1993] com a malha 256×256 . Os resultados da tabela 5.2 indicam que a utilização do esquema *MUSCL* melhora limitadamente os resultados em que $Re = 100$. Nos casos em que $Re = 1000$, o esquema *MUSCL* apresenta resultados significativamente melhores que o esquema híbrido no cálculo de Ψ_{max} , localizado no primeiro vórtice secundário.

Os valores de ε indicam que os resultados obtidos com o programa desenvolvido neste trabalho usando malha fina estão muito próximos dos resultados padrão.

	$Re = 100$		$Re = 1000$	
<i>malha – esquema</i>	$\Psi_{\min}(y_1, y_2)$	$\Psi_{\max}(y_1, y_2)$	$\Psi_{\min}(y_1, y_2)$	$\Psi_{\max}(y_1, y_2)$
32 × 32 – HIB	−0.0706	6.27×10^{-5}	−0.051	7.06×10^{-3}
(y_1, y_2)	(1.114, 0.53)	(0.35, 0.15)	(1.23, 0.53)	(0.67, 0.351)
ε	0.52	69.8	4.71	29.7
32 × 32 – MU	−0.0704	6.16×10^{-5}	−0.0556	1.013×10^{-2}
(y_1, y_2)	(1.12, 0.54)	(0.34, 0.14)	(1.28, 0.545)	(0.76, 0.40)
ε	0.23	66.8	3.88	0.91
64 × 64 – HIB	−0.0705	4.24×10^{-5}	−0.0535	8.91×10^{-3}
(y_1, y_2)	(1.12, 0.54)	(0.34, 0.14)	(1.278, 0.56)	(0.76, 0.405)
ε	0.37	14.8	0.043	11.25
64 × 64 – MU	−0.0705	4.23×10^{-5}	−0.0543	9.985×10^{-3}
(y_1, y_2)	(1.12, 0.54)	(0.34, 0.145)	(1.31, 0.57)	(0.773, 0.40)
ε	0.37	14.5	1.45	0.54
128 × 128 – HIB	−0.0704	3.81×10^{-5}	−0.0538	9.91×10^{-3}
(y_1, y_2)	(1.12, 0.54)	(0.338, 0.14)	(1.312, 0.57)	(0.778, 0.401)
ε	0.23	3.16	0.51	1.28
128 × 128 – MU	−0.0704	3.81×10^{-5}	−0.0537	1.003×10^{-2}
(y_1, y_2)	(1.12, 0.547)	(0.338, 0.143)	(1.32, 0.57)	(0.778, 0.401)
ε	0.23	3.16	0.33	0.09
256 × 256 – HIB	−0.0703	3.67×10^{-5}	−0.0536	1.0033×10^{-2}
(y_1, y_2)	(1.112, 0.544)	(0.338, 0.143)	(1.313, 0.575)	(0.775, 0.399)
ε	0.088	0.63	0.14	0.06
256 × 256 – MU	−0.0703	3.704×10^{-5}	−0.05358	1.0045×10^{-2}
(y_1, y_2)	(1.12, 0.547)	(0.338, 0.143)	(1.313, 0.575)	(0.775, 0.399)
ε	0.088	0.29	0.11	0.06
256 × 256 – Oos.	−0.070238	3.6932×10^{-5}	−0.053523	1.0039×10^{-2}
(y_1, y_2)	(1.11, 0.5469)	(0.339, 0.1409)	(1.3128, 0.5745)	(0.7775, 0.4005)

Tabela 5.2 Valores mínimos e máximos da função de corrente, suas posições e erros relativos percentuais em simulações de escoamentos na cavidade paralelogrâmica.

Os padrões de escoamento expressos pelas linhas de corrente das figuras 5.10 e 5.11 estão em bom acordo com os resultados publicados em [Oosterlee *et al.*, 1993].

A figura 5.12a mostra a variação dos valores de u_1 com x_2 em $x_1 = x_{1max}/2$ (tracejado paralelo ao eixo x_2 na figura 5.8) para o escoamento de $Re = 100$. Nas legendas das figuras, as siglas HIB e MU indicam os esquemas de interpolação do fluxo convectivo híbrido e *MUSCL*, respectivamente, enquanto os números são indicativos das malhas

utilizadas nos cálculos. Os perfis são quase coincidentes, qualquer que seja a malha e os esquemas utilizados.

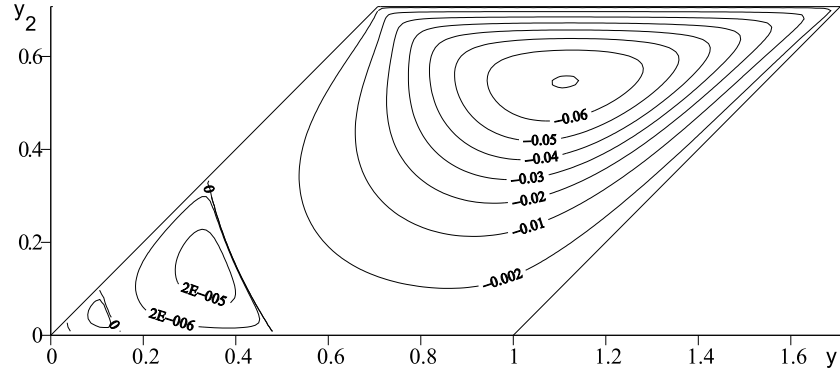


Figura 5.10: Isolinhas da função de corrente no escoamento com $Re = 100$.

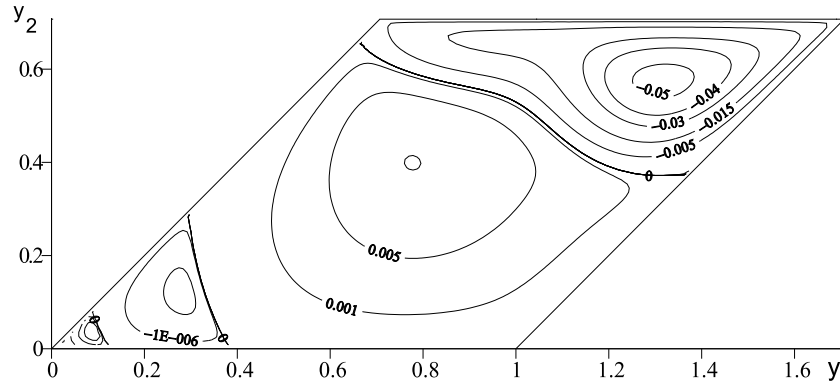


Figura 5.11: Isolinhas da função de corrente no escoamento com $Re = 1000$.

A figura 5.12b apresenta os perfis da componente cartesiana da velocidade u_2 para $x_2 = x_{2\max}/2$ (tracejado paralelo ao eixo x_1 na figura.5.8) para o escoamento de $Re = 100$. Os perfis são quase coincidentes, qualquer que seja a malha e os esquemas utilizados, incluindo o esquema *upwind* que não foi representado.

Para $Re = 1000$, as curvas $u_1(x_2)$ e $u_2(x_1)$ usando malhas e esquemas convectivos diferentes (figura 5.13) mostram a independência aproximada dos resultados nos casos

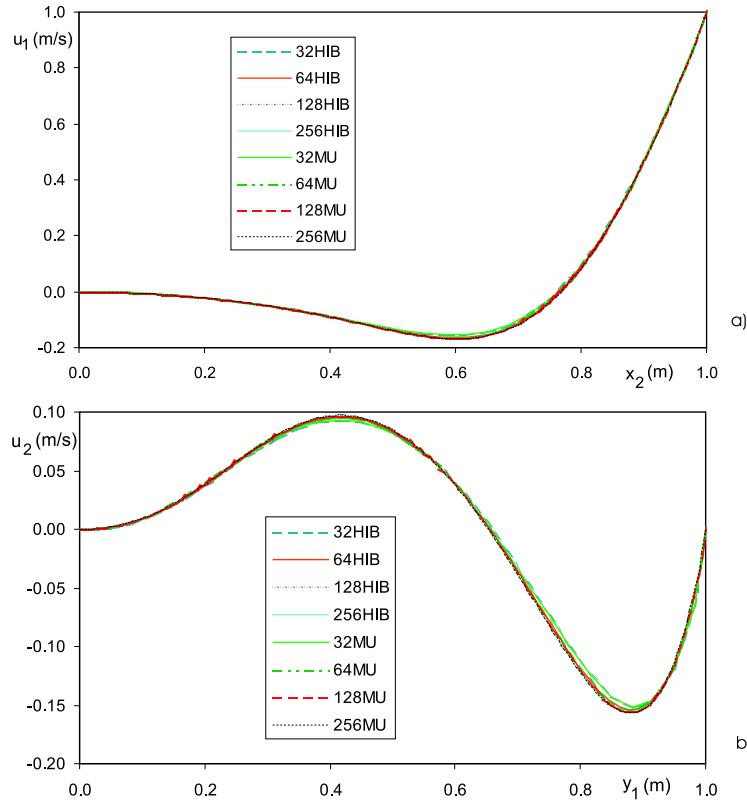


Figura 5.12: Perfis calculados para $Re = 100$ das componentes da velocidade: a) u_1 ao longo da coordenada x_2 em $x_1 = \frac{x_{1\max}}{2}$; b) u_2 ao longo da coordenada x_1 em $x_2 = \frac{x_{2\max}}{2}$.

256HIB, 128MU e 256MU. Os casos 128HIB e 64MU apresentam precisão próxima dos casos anteriores e os resultados estão muito próximos entre si. Com graus de precisão equivalente entre si apresentam-se também os casos 64HIB e 32HIB. Para este problema, a precisão obtida com o esquema *MUSCL* com determinada malha é aproximadamente igual à precisão do esquema híbrido com uma malha com densidade linear dupla.

Embora não esteja representado na figura 5.13, o esquema *upwind* foi testado igualmente com $Re = 1000$. Apresenta erros elevados nas malhas grosseiras, diminuindo nas malhas refinadas tal como esperado, destacando-se no entanto claramente do conjunto de resultados 256HIB, 128MU e 256MU, especialmente nas proximidades da fronteira $x_1 = 1$ no caso da curva $u_2(x_1)$ e da fronteira $x_2 = 1$ no caso da curva $u_1(x_2)$.

Os perfis das componentes da velocidade das figuras 5.12 e 5.13 com uso de es-

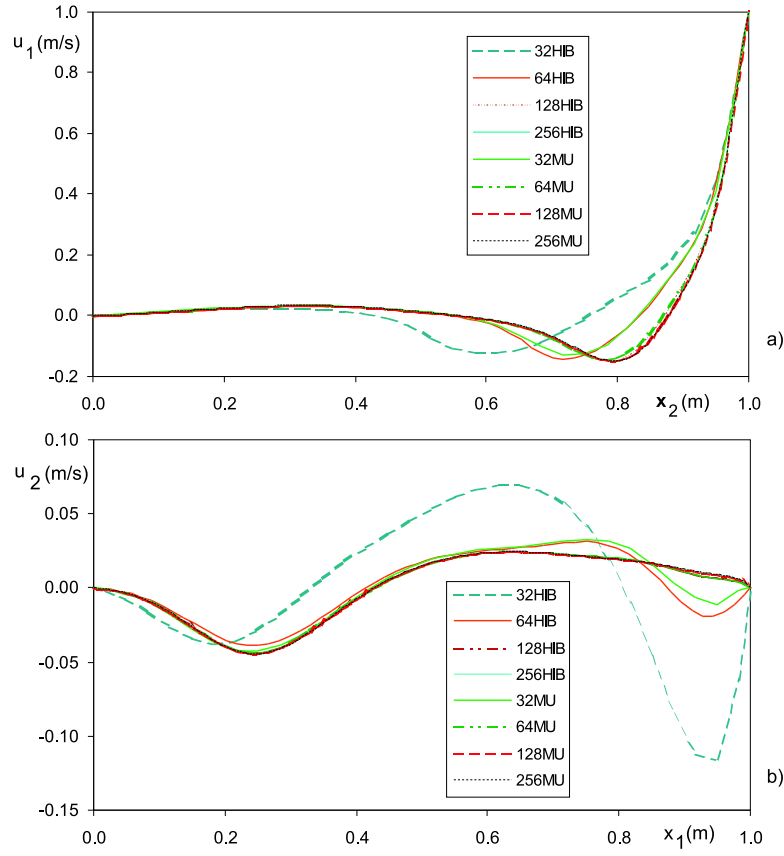


Figura 5.13: Perfis calculados para $Re = 1000$ das componentes da velocidade: a) u_1 ao longo da coordenada x_2 em $x_1 = \frac{x_{1\max}}{2}$; b) u_2 ao longo da coordenada x_1 em $x_2 = \frac{x_{2\max}}{2}$.

quemas *MUSCL* e híbrido e malhas refinadas mostram que os valores extremos e suas localizações são praticamente coincidentes com os das soluções padrão publicadas em [Oosterlee *et al.*, 1993]. O esquema *upwind* apresenta erros significativos com qualquer das malhas utilizadas. O esquema *MUSCL* apresenta resultados de boa qualidade com malha pouco refinada, nomeadamente malha de 64×64 nós.

5.3 Jactos confinados axi-simétricos num difusor

5.3.1 O caso em estudo

O escoamento turbulento de água num difusor representado na figura 5.14 foi estudado experimentalmente por [Kian, 1981]. O fluido tem massa volúmica $\rho = 998 \text{ kg/m}^3$ e viscosidade $\mu = 10^{-3} \text{ kg/(ms)}$. A entrada do fluido no difusor é feita axialmente por intermédio de dois orifícios concêntricos. No orifício circular central, de diâmetro $d = 0.016 \text{ m}$, a velocidade é de 0.4 ms^{-1} , enquanto no tubo anelar de diâmetro interno d e diâmetro externo $D = 0.16 \text{ m}$ a velocidade é de 0.0233 ms^{-1} . A parede cônica estende-se até à distância $L = 0.64 \text{ m}$ da entrada e faz um ângulo de 2.5° em relação ao eixo. O comprimento total do tubo é de 1.2 m .

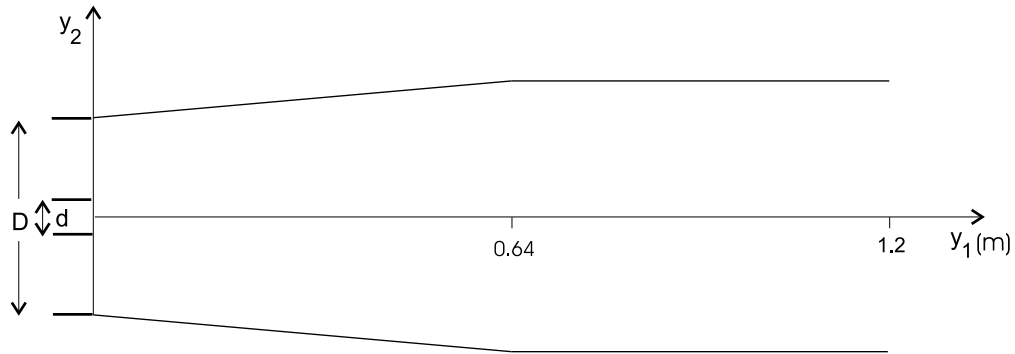


Figura 5.14: Configuração (com escala alterada) do difusor referido em [Zhu e Rodi, 1992].

[Zhu e Rodi, 1992] realizaram um estudo numérico deste escoamento. Estes autores usaram equações de transporte com coordenadas não ortogonais e componentes cartesianas da velocidade. As equações de transporte algébricas são obtidas pelo método dos volumes finitos em malhas não deslocadas de 68×50 e 102×88 nós. Os esquemas de interpolação do termo convectivo usados são o híbrido, QUICK e SOUCUP. O modelo de turbulência é o $k - \epsilon$.

Em $y_1 = 0$, as componentes u_1 e u_2 da velocidade apresentam os valores seguintes:

$$\begin{aligned}
 u_2 &= 0 \\
 u_1 &= u_{1J} = 0.4ms^{-1} & se & y_2 < r_J \\
 u_1 &= u_{1A} = 0.233ms^{-1} & se & y_2 > r_A \\
 u_1 &= u_{1A} + (u_{1J} - u_{1A}) \cdot \left[1 - \left(\frac{y_2 - r_J}{r_A - r_J} \right)^{3/2} \right]^2 & se & r_J < y_2 < r_A . \quad (5.9)
 \end{aligned}$$

r_J e r_A são os extremos da camada de corte entre os jactos cilíndrico e anelar e se relacionam por intermédio de

$$\delta = 2(r_A - r_J)/d . \quad (5.10)$$

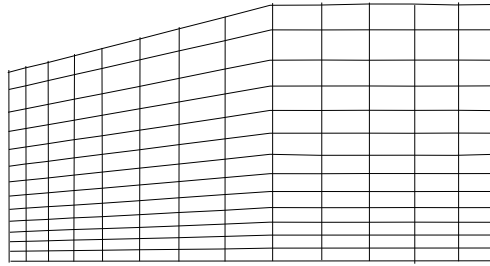


Figura 5.15: Malha do tipo usado na simulação do escoamento referido em [Zhu e Rodi, 1992], com as dimensões alteradas.

De acordo com os dados experimentais e as opções de [Zhu e Rodi, 1992], $\delta = 1$. Na zona entre os jactos cilíndrico e anelar consideram que o perfil da componente u_1 da velocidade é linear.

Para as variáveis k , ε e μ_t são adoptados por estes autores valores de entrada semi-empíricos:

$$\begin{aligned}
 k &= \frac{\nu_t}{C_\mu^{1/2}} \left| \frac{\partial u_1}{\partial y_2} \right| \quad ; \quad \varepsilon = C_\mu k^2 / \nu_t \quad ; \quad \nu_t = C^2 (r_A - r_J)^2 \left| \frac{\partial u_1}{\partial y_2} \right| \\
 \text{com} \quad C^2 &= 0.0042 + 0.004 \frac{u_{1A}}{u_{1J}} & se & r_J < y_2 < r_A \\
 \text{ou} \quad k &= 10^{-9} m^2 s^{-2} \quad ; \quad \varepsilon = 10^{-9} m^2 s^{-3} & se & y_2 < r_J \text{ ou } y_2 > r_A . \quad (5.11)
 \end{aligned}$$

Os resultados usando os esquemas SOUCUP e QUICK são muito semelhantes, enquanto os resultados com o esquema híbrido mostram que seria necessário o uso de

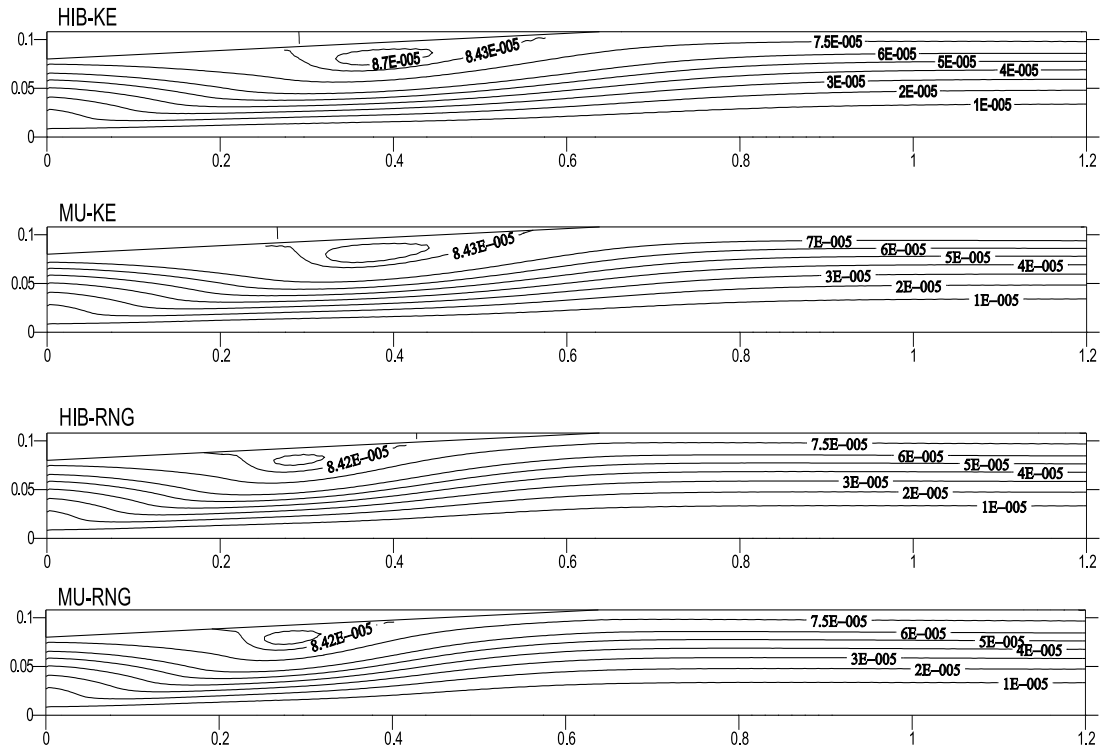


Figura 5.16: Isolinhas da função corrente obtidas por simulação do escoamento apresentado em [Kian, 1981]. As siglas *KE* e *GRN* referem-se aos modelos de turbulência $k-\varepsilon$ clássico e com o método do grupo de renormalização, repectivamente.

malhas mais densas para a obtenção de convergência com os resultados dos outros esquemas. Todas as escolhas conduzem a previsões da velocidade com perfis semelhantes aos experimentais, o que não sucede em relação à energia cinética turbulenta, cujos resultados numéricos se afastam significativamente dos experimentais.

5.3.2 Modelo utilizado e comparação de resultados

As equações de transporte resolvidas usam componentes cartesianas da velocidade e são discretizadas numa malha única com coordenadas curvilíneas não ortogonais. As equações apresentam simetria cilíndrica pelo que a malha é bidimensional. Os esquemas de representação dos fluxos convectivos nas faces dos volumes de controlo foram o híbrido e o *MUSCL* aplicado como correcção diferida do esquema *upwind*. A turbulência é descrita pelos modelos $k-\varepsilon$ e $k-\varepsilon - RNG$.

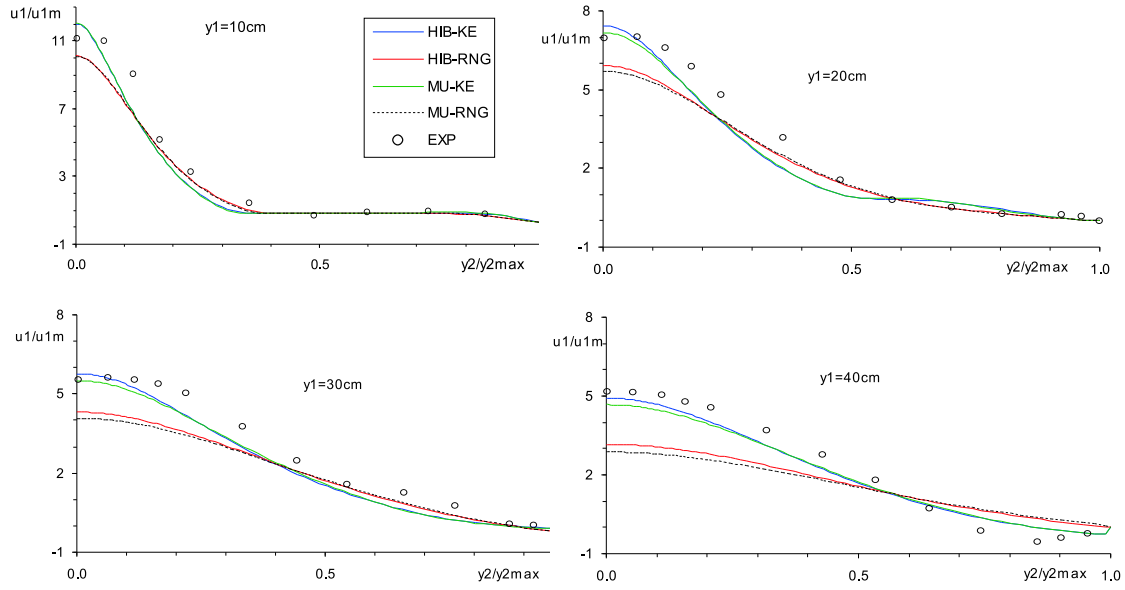


Figura 5.17: Perfis radiais da componente axial da velocidade normalizada pelo seu valor médio, u_{1m} , para diversos valores de y_1 .

As simulações foram efectuadas em malhas de 68×50 e 102×82 nós. A figura 5.15 mostra uma malha análoga mas com um menor número de nós para facilitar a visualização.

As condições de fronteira adoptadas foram as referidas acima, com a escolha $r_J = d/2$.

Os resultados obtidos com as malhas referidas de diferente densidade usando o esquema híbrido são bastante próximos entre si, e são praticamente coincidentes quando se usa o esquema *MUSCL*. Os resultados analisados nesta subsecção foram obtidos com uma malha de 102×82 nós.

A função corrente adaptada a um escoamento tridimensional com simetria cilíndrica é definida por

$$u_1 = \frac{1}{y_2 \delta \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial y_2}; \quad u_2 = -\frac{1}{y_2 \delta \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial y_1}, \quad (5.12)$$

em que o ângulo $\delta \theta$ é definido nos planos perpendiculares ao eixo de simetria sendo-lhe atribuído valor unitário. A função de corrente assim definida tem unidades de m^3/s .

Usando o modelo $k - \varepsilon$, as linhas de corrente calculadas (figura 5.16) são muito semelhantes às publicadas em [Zhu e Rodi, 1992]. Com o modelo $k - \varepsilon - RNG$ a posição e

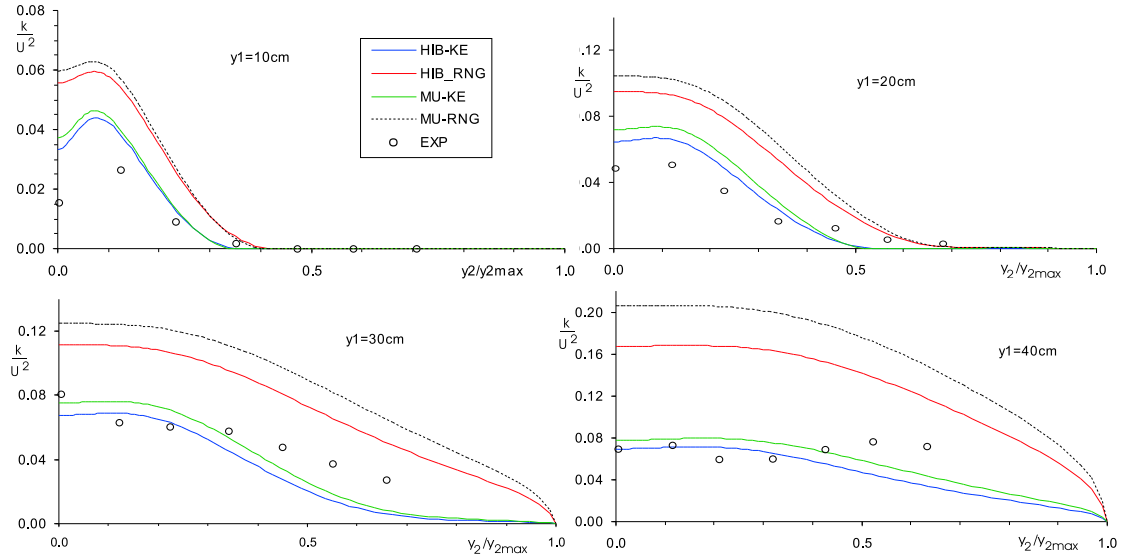


Figura 5.18: Perfis radiais da energia turbulenta normalizada pelo quadrado da velocidade sobre o eixo, para diversos valores de y_1 .

dimensões do vórtice secundário tornam-se significativamente diferentes das experimentais apresentadas no mesmo artigo.

A figura 5.17 compara os perfis radiais experimentais e calculados da velocidade axial. Os resultados indicam haver pouca dependência da velocidade calculada em relação ao esquema de discretização. O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ clássico conduz a resultados bastante próximos dos experimentais. A difusão de momento na direcção radial parece ser menos intensa do que observado experimentalmente. Com a versão *RNG* há um maior afastamento em relação aos valores experimentais. A difusão de momento é mais intensa, resultando numa maior uniformização da velocidade, no mais rápido desaparecimento do jacto central e na diminuição das dimensões e intensidade do vórtice secundário.

A previsão da energia cinética turbulenta apresenta perfis qualitativamente semelhantes aos experimentais, mas com valores que se afastam bastante, especialmente com o modelo $k - \varepsilon - RNG$ (figura 5.18). A viscosidade turbulenta calculada com este modelo apresenta valores superiores aos calculados com o $k - \varepsilon$ clássico, o que justifica uma maior uniformidade da velocidade média quando se usa $k - \varepsilon - RNG$.

A sensibilidade dos resultados de k ao esquema convectivo é maior do que a

verificada com o cálculo da velocidade, e aumenta para jusante quando se usa o modelo *RNG*. Com o aumento de y_2 na zona de recirculação, os valores calculados apresentam diminuição mais abrupta do que a indicada pelos dados experimentais.

Algumas discrepâncias observadas poderão eventualmente ser atribuídas a erros experimentais ([Zhu e Rodi, 1992]) ou a propostas de valores na fronteira de entrada menos realistas.

5.4 Jactos coaxiais turbulentos com rotação em tubo com expansão súbita

5.4.1 O caso em estudo

O escoamento turbulento com rotação no interior de um tubo cilíndrico com expansão súbita é produzido por acção de dois jactos concêntricos (figura 5.19). Este escoamento foi estudado experimentalmente por [Roback e Johnson, 1983].

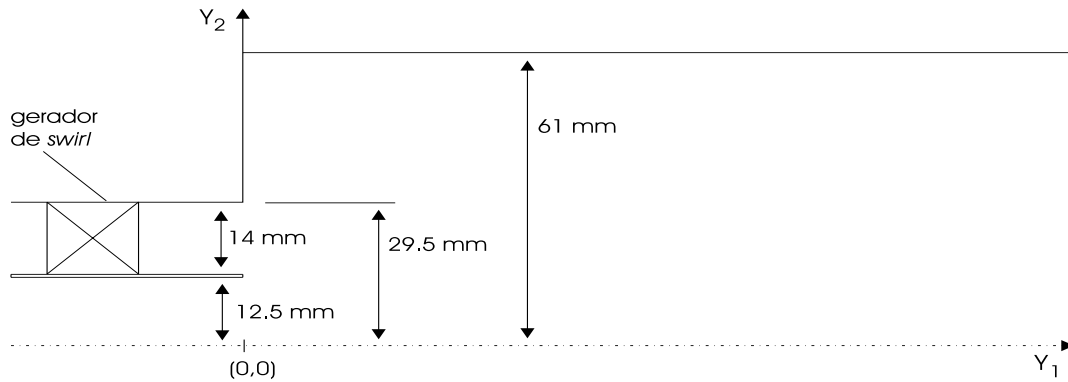


Figura 5.19: Secção do tubo usado nas experiências de [Roback e Johnson, 1983].

Dois jactos de água coaxiais entram num tubo cilíndrico de $1.22m$ de comprimento e $122mm$ de diâmetro. O tubo de entrada de água interior tem $25mm$ de diâmetro e o tubo de entrada exterior tem diâmetro interno de $31mm$ e diâmetro externo de $59mm$. A velocidade média na entrada circular interior é de $0.53m/s$ e na entrada anelar é de $1.67m/s$. Nesta última entrada, o fluido é introduzido com um movimento de rotação caracterizado por um número de *swirl* $S = 0.38$. S é uma medida da razão do fluxo axial

de momento angular pelo fluxo axial de momento linear, e é definido por

$$S = \frac{\int_{R_1}^{R_2} r^2 \rho u_1 u_3 dr}{R \int_{R_1}^{R_2} r \rho u_1^2 dr} , \quad (5.13)$$

em que r é a distância variável ao eixo de rotação, R é um valor de r característico, geralmente a média entre R_1 e R_2 , que são os limites de r .

O escoamento descrito dá origem a duas zonas de recirculação toroidais, uma central a uma distância aproximada de $1/4$ do diâmetro do tubo a partir da zona de expansão (plano $y_1 = 0$) e outra na zona de intersecção entre o plano de expansão e a parede cilíndrica.

As condições de entrada são determinadas de forma aproximada com base nos dados experimentais conhecidos em $y_1 = 5.1mm$. Os diversos autores utilizam diferentes condições de entrada obtidas com base nos mesmos resultados experimentais.

Resultados numéricos são apresentados, entre outros, por [Durst e Wennerberg, 1991], [Grunert *et al.*, 1996], [Lin, 1998] e uma síntese de resultados por [Jakirlic *et al.*, 2001].

[Durst e Wennerberg, 1991] resolveram as equações de transporte em coordenadas cilíndricas discretizadas pelo método dos volumes finitos em malhas deslocadas com diversos esquemas de representação do fluxo convectivo, o modelo $k - \varepsilon$ de turbulência e a pressão calculada com uso do algoritmo *SIMPLE*. Estes autores referem que os valores extrapolados da velocidade usados na entrada podem ter erros até 10% ou 15%. A zona de recirculação central é prevista com dimensões totais muito próximas das experimentais. Os perfis calculados da velocidade são semelhantes aos experimentais com excepção da componente tangencial a jusante da zona de recirculação central. Os perfis da intensidade turbulenta apresentam acordo limitado em relação aos resultados experimentais.

[Lin, 1998] usa os modelos de turbulência $k - \varepsilon$ e $k - \varepsilon - v^2 - f$ ([Durbín, 1995]). A discretização das equações do momento linear e de escalares é feita pelo método dos volumes finitos em malhas deslocadas. Usa o algoritmo *SIMPLE* para cálculo da pressão e correcção da velocidade. Os fluxos convectivos são calculados pelo esquema *QUICK* ([Leonard, 1979]). A fronteira de entrada no domínio de cálculo foi colocada antes do plano de expansão. O perfil de *swirl* na entrada foi forçado por intermédio de uma força introduzida na equação do momento tangencial. A comparação dos resultados experimen-

tais e calculados por vários métodos mostrou que, para a velocidade e para as variáveis escalares estritamente conservadas, os resultados usando *LES* (obtidos por outros autores) são mais próximos dos experimentais do que usando $k - \varepsilon$. Entre as versões $k - \varepsilon$ clássica e $v^2 - f$ não se verificam diferenças significativas nos resultados.

[Grunert *et al.*, 1996] resolve as equações de transporte das tensões de Reynolds em coordenadas curvilíneas não ortogonais usando uma malha única. A discretização dos termos convectivos foi efectuada pelos esquemas *upwind* e *MUSCL*. Com uma malha de 150×100 nós, a diferença entre os resultados numéricos para a velocidade não é significativa e, comparados com os experimentais, parecem ter o mesmo nível de precisão que os apresentados por [Lin, 1998] com o modelo $k - \varepsilon$.

Os resultados comparados por [Jakirlic *et al.*, 2001] indicam globalmente um melhor desempenho dos modelos $k - \varepsilon$ do que dos modelos das tensões de Reynolds. No caso do modelo $k - \varepsilon$, o cálculo com utilização do grupo de renormalização não melhora os resultados. Estes aspectos são justificados por [Jakirlic *et al.*, 2001] como devidos à sobreposição de dois fenómenos, separação do escoamento e *swirl*, que individualmente são incorrectamente determinados pelo modelo $k - \varepsilon$ clássico, mas cujos erros se compensam mutuamente.

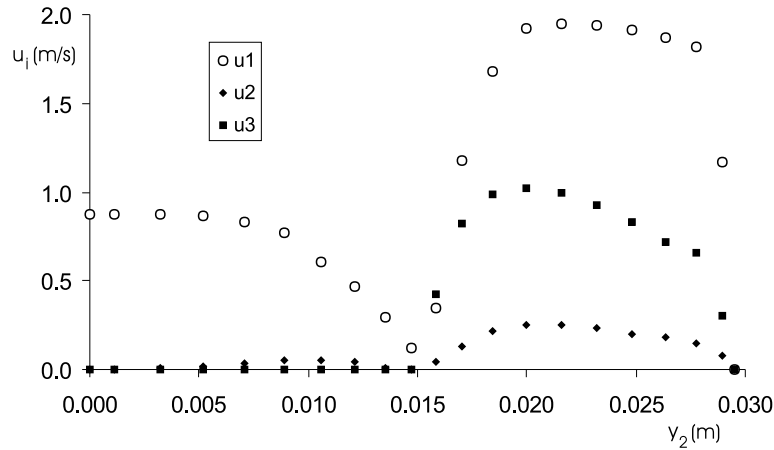


Figura 5.20: Valores de u_1 , u_2 e u_3 em $y_1 = 0$ ([Jakirlic *et al.*, 2001]).

5.4.2 Modelo utilizado e comparação de resultados

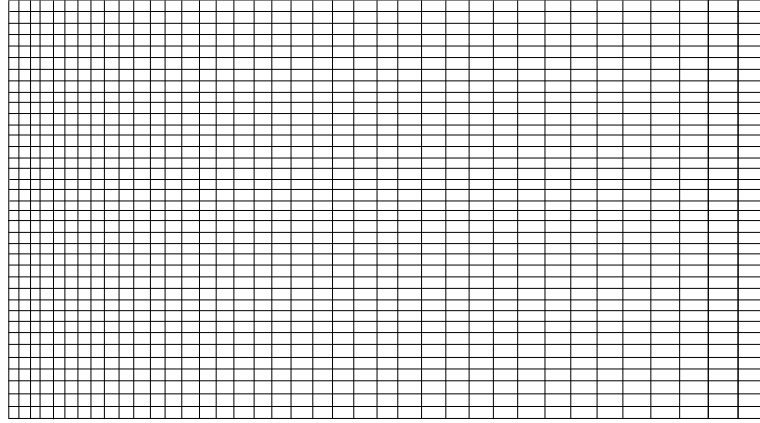


Figura 5.21: Malha utilizada no escoamento com rotação. Para facilidade de visualização é representada com 39×38 nós.

Nas simulações efectuadas os valores adoptados para a velocidade de entrada são os utilizados em [Jakirlic *et al.*, 2001]. A figura 5.20 mostra os valores das componentes da velocidade na entrada extrapolados a partir dos dados experimentais.

As malhas utilizadas com 78×76 e 154×150 nós foram construídas de forma análoga à representada na figura 5.21.

As simulações foram efectuadas num domínio em que o eixo y_1 tem o valor máximo de $0.4m$. As condições de fronteira adoptadas nesta superfície consideram os valores das componentes da velocidade no nó de fronteira iguais aos valores no nó anterior, enquanto para a pressão se optou por uma extrapolação linear. Estes procedimentos são justificados pela observação dos resultados de [Durst e Wennerberg, 1991] e pelos resultados numéricos obtidos que sugerem não ser necessária a extensão dos cálculos até à fronteira experimental em $y_1 = 1.22m$.

As linhas de corrente calculadas com o esquema *MUSCL* e o modelo $k - \varepsilon$ são apresentadas na figura 5.22. A extensão e localização do vórtice livre central são previstas com boa precisão. A extensão da recirculação confinada é prevista com um défice de aproximadamente 20% que se associa à curvatura do jacto anelar nessa região. A recirculação central experimental ([Durst e Wennerberg, 1991]) apresenta uma reentrância que não é reproduzida pelas simulações com as condições de velocidade na entrada adoptadas. É

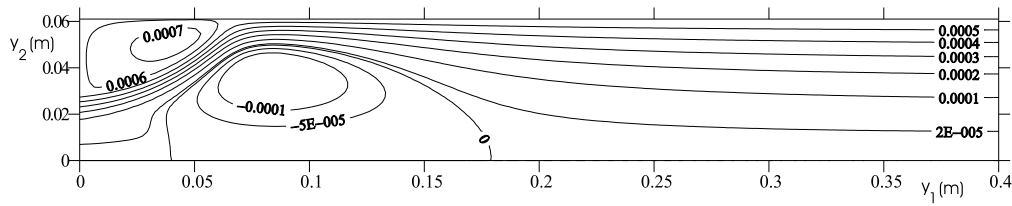


Figura 5.22: Isolinhas da função corrente calculadas com o esquema *MUSCL* e o modelo $k - \varepsilon$ para o escoamento apresentado em [Roback e Johnson, 1983].

possível reproduzi-la de forma aproximada em simulações com alteração ligeira da velocidade do jacto central na entrada, particularmente com uso do modelo $k - \varepsilon - RNG$. Este facto introduz alguma incerteza quanto à exactidão das condições na entrada, sobre as quais não existe unanimidade, e quanto às características dos métodos utilizados nas simulações.

Os resultados numéricos são confrontados com os experimentais nas figuras 5.23-5.26.

A componente axial u_1 da velocidade (figura 5.23) é calculada com razoável precisão nos planos y_1 representados, com excepção dos planos $y_1 = 25.4mm$ e $y_1 = 50.8mm$ com uso do modelo de turbulência $k - \varepsilon - RNG$. O jacto central calculado com este modelo é nessa zona mais intenso que o experimental, enquanto o jacto anelar calculado em $y_1 = 50.8mm$ é mais estreito e intenso que o experimental. O modelo $k - \varepsilon$ clássico reproduz melhor os resultados experimentais da componente axial da velocidade.

O cálculo da componente radial u_2 da velocidade (figura 5.24) produz resultados próximos dos experimentais, excepto com o modelo $k - \varepsilon - RNG$ usando o esquema *MUSCL* em $y_1 = 50.8mm$, correspondendo a um jacto anelar menos espesso nessa zona.

Os valores da componente tangencial da velocidade u_3 calculados pelos diversos métodos apresentam grande proximidade entre si.

Entre a secção de entrada de fluido na conduta e o início da recirculação central, a componente tangencial u_3 da velocidade (figura 5.25) calculada por qualquer dos métodos apresenta resultados bastante próximos dos experimentais. O mínimo relativo de u_3 em $(y_1, y_2) = (5.1mm, 30mm)$ indica que a tensão na direcção y_3 calculada nas paredes sobre o vórtice confinado é demasiado intensa, conduzindo a que o valor de u_3

seja baixo na zona em que troca momento linear com o jacto anelar. Para valores de $y_1 \geq 101.6mm$, os valores calculados da componente u_3 vão-se progressivamente reduzindo em relação aos experimentais, o que não parece poder atribuir-se às tensões na parede do cilindro por ser precisamente nessa zona que u_3 apresenta os valores mais elevados. Este aparente déficit de momento angular (note-se que os perfis $u_1(y_2)$ numéricos e experimentais são muito próximos para $y_1 \geq 101.6mm$) é igualmente observado nos cálculos de [Durst e Wennerberg, 1991] e [Jakirlic *et al.*, 2001] usando modelos $k - \varepsilon$. Nos cálculos que utilizam *LES* ou tensões de Reynolds este déficit não está presente. Nos cálculos de [Lin, 1998] utilizando $k - \varepsilon$ não surge esta discrepância, mas os valores de entrada da componente u_3 adoptados parecem ser superiores aos utilizados no presente trabalho.

A figura 5.26 apresenta valores numéricos e experimentais da energia cinética turbulenta k . Para valores de y_1 até ao do início da recirculação central, a discordância entre valores numéricos e experimentais é significativa, apresentando no entanto o modelo $k - \varepsilon$ clássico perfis qualitativamente semelhantes aos experimentais. Para valores de y_1 maiores que o de máxima espessura da zona de recirculação central todos os métodos apresentam um acordo razoável com os dados experimentais, com a excepção do máximo de $k(y_1)$ que ocorre na proximidade da parede do cilindro no plano em que a espessura da zona de recirculação é máxima.

Os resultados da simulação que efectuámos reproduzem com proximidade bastante os resultados numéricos e experimentais publicados.

O perfil linear das variáveis dependentes na coordenada radial, equação (4.26), foi confrontado com o perfil logarítmico da equação (4.27), tendo-se constatado que, para este problema, as soluções são praticamente coincidentes.

O melhor comportamento global do modelo $k - \varepsilon$ clássico contraria a suposta superioridade relativa do modelo $k - \varepsilon - RNG$. Segundo [Jakirlic *et al.*, 2001] a superioridade do modelo $k - \varepsilon$ clássico, que se manifesta também em relação aos resultados do modelo das tensões de Reynolds, pode dever-se a um efeito de compensação de erros. A sobreposição de dois fenómenos que o modelo $k - \varepsilon$ clássico calcula incorrectamente, a separação do escoamento e o *swirl*, seria responsável pela qualidade aparente dos resultados. Sem mais análise esta suposição não pode ser confirmada pois, nas simulações apresentadas na secção anterior com ausência de *swirl* e existindo separação, o modelo $k - \varepsilon$ clássico parece ter igualmente um comportamento superior ao modelo $k - \varepsilon - RNG$.

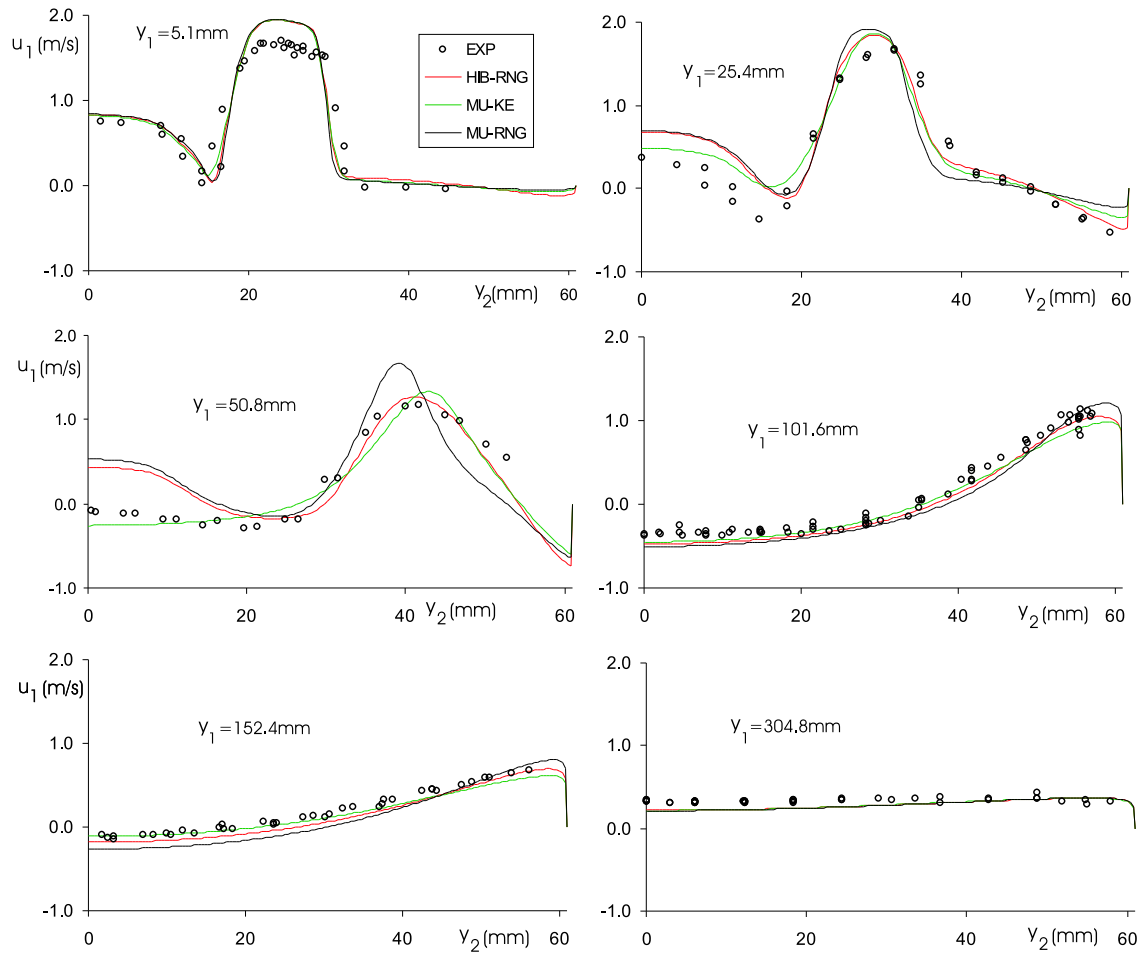


Figura 5.23: Perfis radiais experimentais e numéricos da componente axial da velocidade em várias posições y_1 .

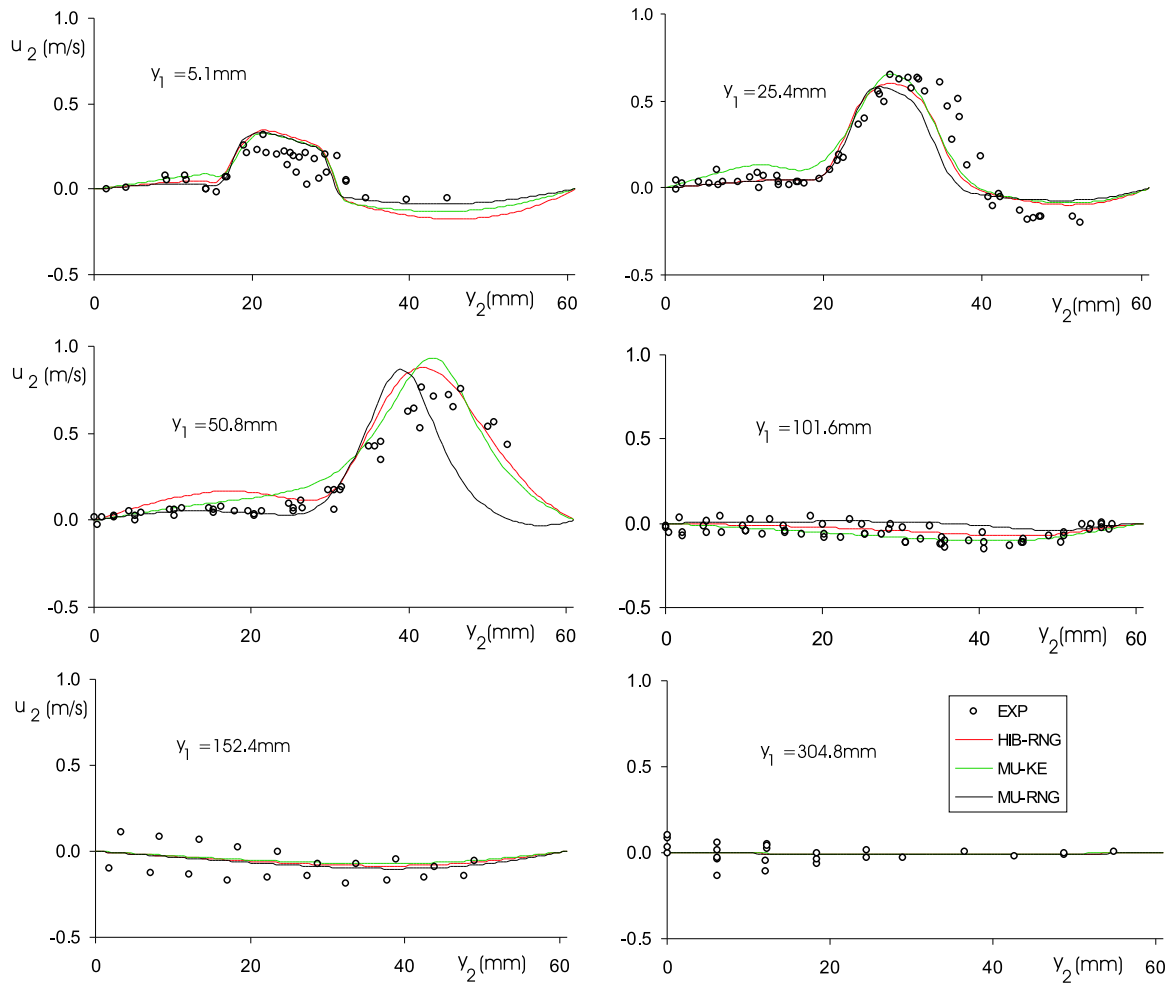


Figura 5.24: Perfis radiais experimentais e numéricos da componente radial da velocidade em várias posições y_1 .

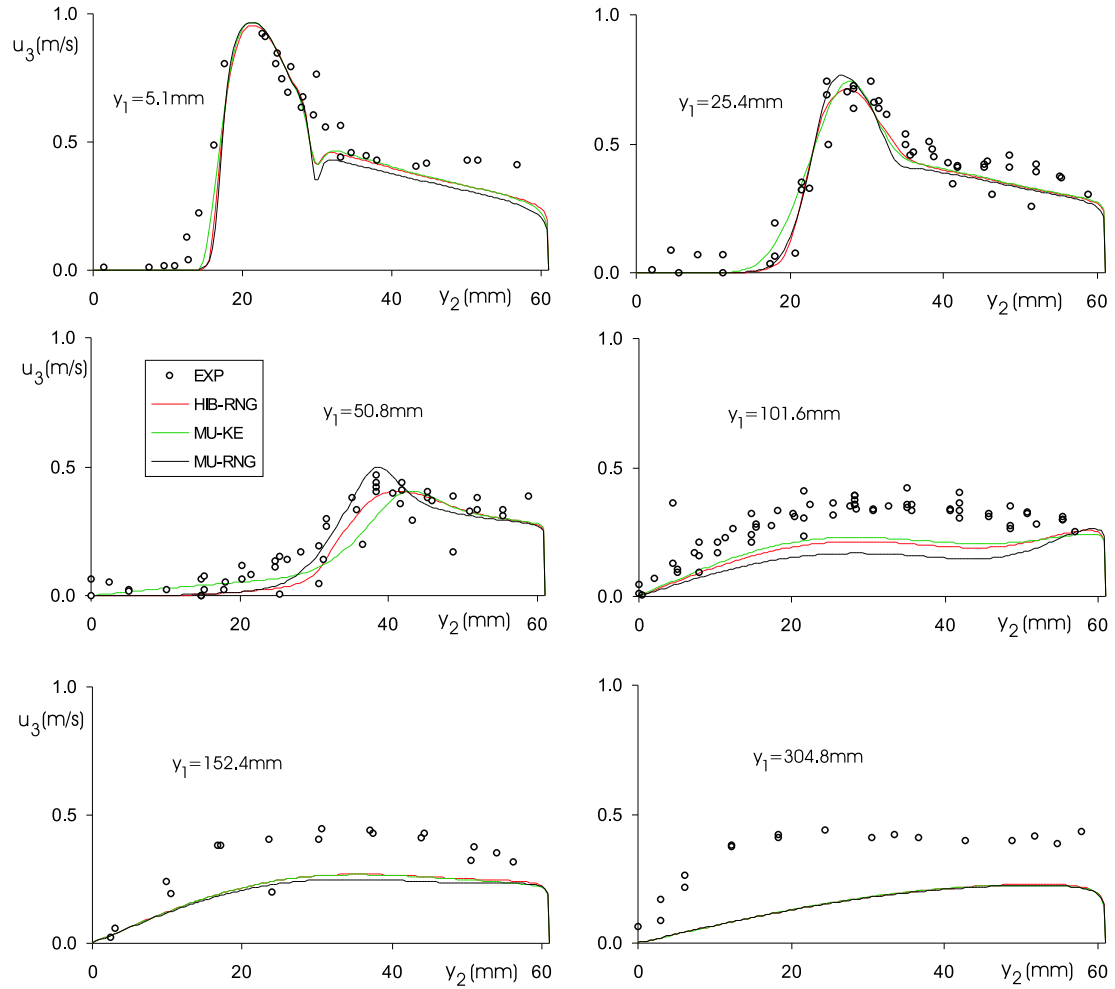


Figura 5.25: Perfis radiais experimentais e numéricos da componente tangencial da velocidade em várias posições y_1 .

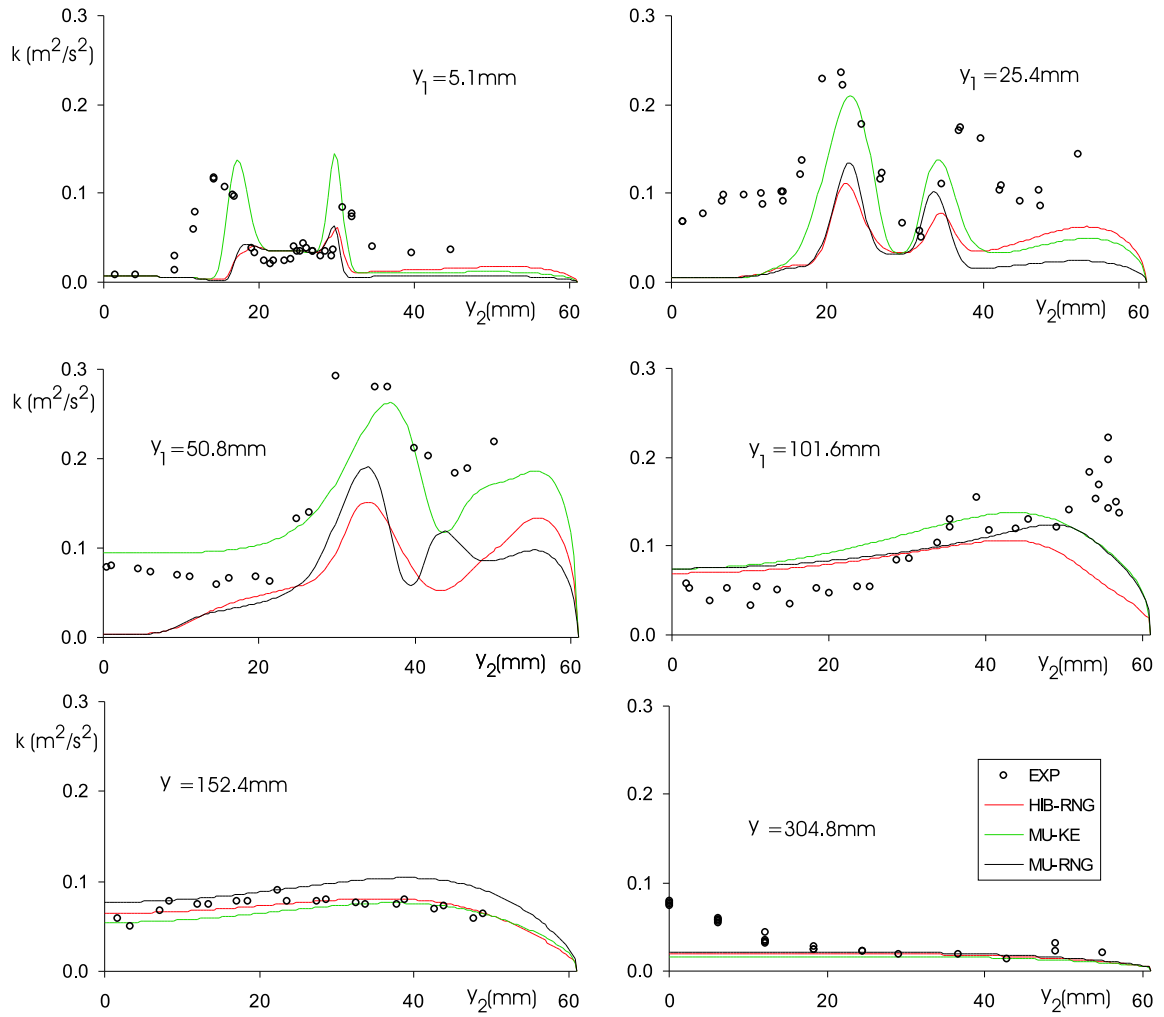


Figura 5.26: Perfis radiais experimentais e numéricos da energia turbulenta em várias posições y_1 .

Capítulo 6

Simulação de uma câmara de combustão

Na concepção de uma câmara de combustão são geralmente objectivos a atingir a obtenção de elevada eficiência térmica com dimensões e emissão de poluentes limitados e uma distribuição de temperatura pré-determinada. A capacidade de desenvolver sistemas eficientes em termos térmicos, sonoros, ambientais e económicos está condicionada pela complexidade e interacção dos vários fenómenos envolvidos na combustão. As escolhas quanto à geometria da câmara e do queimador, a utilização de *swirl*, o aquecimento das alimentações, a recirculação dos gases queimados e o regime de funcionamento condicionam a realização dos objectivos propostos. O número de montagens alternativas com verificação experimental dos seus desempenhos é limitado por motivos económicos. A simulação numérica dos escoamentos com combustão é geralmente muito mais flexível e económica do que o desenvolvimento de protótipos e experimentação. Os métodos mais fiáveis usados na simulação numérica (simulação numérica directa, métodos de Monte Carlo, *LES*) não são actualmente utilizáveis de forma extensiva na concepção ou sequer para a simulação isolada de um sistema de queima em regime turbulento com número de Reynolds elevado. Os métodos baseados nas equações de transporte médias requerem a modelação semi-empírica de diversas quantidades desconhecidas.

A utilização de um conjunto de modelos nos métodos de simulação numérica requer, para verificar o desempenho desses modelos, a existência de um conjunto de dados

experimentais fiáveis e em quantidade suficiente com os quais se possam comparar os resultados das simulações baseadas nos modelos referidos. Neste capítulo serão usados os métodos descritos em capítulos anteriores para a simulação numérica de uma câmara de combustão de que são conhecidos suficientes dados experimentais fiáveis.

A geometria da câmara de combustão simulada neste trabalho e as condições de operação são descritas na secção 6.1. Os métodos usados na simulação são incluídos na subsecção 6.2.1. A composição química calculada das *flamelets* utilizadas para cálculo da composição média é apresentada na subsecção 6.2.2. A análise de resultados é efectuada na secção 6.2.3.

6.1 Descrição da geometria e regime de operação

A câmara considerada é representada na figura 6.1, estando o eixo posicionado verticalmente.

Os dados experimentais de [Kaufman *et al.*, 1994] são apresentados com referência à coordenada x que se relaciona com a coordenada y_1 da simulação numérica por intermédio de $x \equiv y_1 + 0.195m$.

As possibilidades de recirculação externa de produtos da combustão e de alimentação de combustível aquecido não são utilizadas. O combustível (gás natural) é introduzido na câmara por intermédio de 24 orifícios de $1.8mm$ de diâmetro com uma velocidade radial média de $157.77m/s$. O ar é introduzido com movimento de rotação com componentes axial e tangencial da velocidade dadas pelas expressões

$$\begin{aligned} u_1(r) &= \sum_{n=0}^6 c_n r^n \\ u_3(r) &= \sum_{n=0}^6 d_n r^n, \end{aligned} \tag{6.1}$$

com os parâmetros c_n e d_n especificados em [Kaufman *et al.*, 1994].

Os valores da temperatura nas fronteiras são indicados na tabela 6.1.

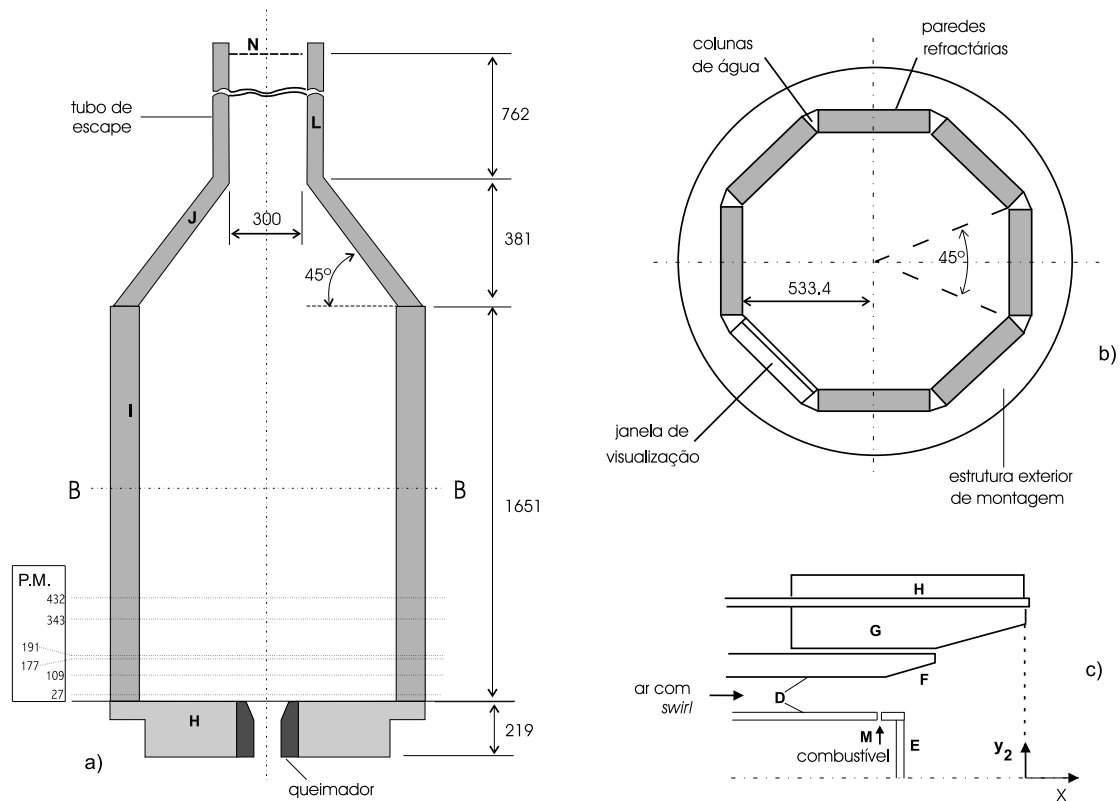


Figura 6.1: a) Geometria da câmara BERL; P.M.- planos das medições; b) secção BB da alínea anterior; c) queimador. Distâncias em *mm*.

Fronteira	T/K
D	312
E	1173
F	1173
G	1273
H	1100
I	eq. (6.2)
J	1305
L	1370
M	308
N	1386

Tabela 6.1 Valores da temperatura nas fronteiras (ver figura 6.1).

A temperatura na superfície I é dada pela expressão

$$T(y_1) = \sum_{n=0}^6 m_n \cdot y_1^n \quad (6.2)$$

com os parâmetros m_n especificados em [Kaufman *et al.*, 1994].

A composição química do gás natural é indicada em [Kaufman *et al.*, 1994], que sugerem uma composição simplificada (tabela 6.2) que conduz a resultados térmicos e de composição química dos produtos semelhantes e será adoptada na simulação.

<i>espécie</i>	<i>fracção mássica</i>
CH_4	0.97
N_2	0.022
CO_2	0.008

Tabela 6.2 composição química da mistura combustível.

O oxidante é ar à temperatura de $312K$ considerado composto por $Y_{O_2} = 0.2315$ e $Y_{N_2} = 0.7685$.

6.2 A simulação do escoamento com combustão

6.2.1 Métodos usados na simulação

Os modelos e métodos apresentados nos capítulos 3 e 4 foram utilizados nas simulações. São resolvidas as equações de transporte das médias das seguintes grandezas: componentes cartesianas da velocidade, fracção de mistura, variância da fracção de mistura, entalpia, energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação. É resolvida uma equação para cálculo da correcção da pressão baseada na equação de conservação da massa. Para obviar ao acréscimo de tempo de cálculo associado à utilização de um modelo detalhado de radiação, o modelo de radiação de meio opticamente fino foi utilizado para o cálculo do transporte da energia radiativa. A temperatura foi calculada a partir dos valores da entalpia média por inversão de uma equação algébrica $\tilde{h}(T)$. O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ foi utilizado na sua versão clássica e na versão *RNG* (grupo de renormalização). O cálculo da composição química média utiliza o modelo das *flamelets* laminares deformadas. Os valores médios \widetilde{Y}_k das fracções mássicas das espécies químicas são calculados por meio de funções densidade de probabilidade presumidas dos parâmetros Z e χ . Os valores destes

parâmetros determinam os valores instantâneos de Y_k no modelo das *flamelets*. O cálculo das *flamelets* com as condições de fronteira respeitantes a este problema é feito uma única vez independentemente da solução das equações de transporte. Para todos os casos em que $\tilde{\chi} > \chi_q (\simeq 39.67s^{-1})$, o cálculo dos valores médios das fracções mássicas foi efectuado recorrendo aos valores instantâneos da *flamelet* extinta calculada com o valor $\chi = 40s^{-1}$.

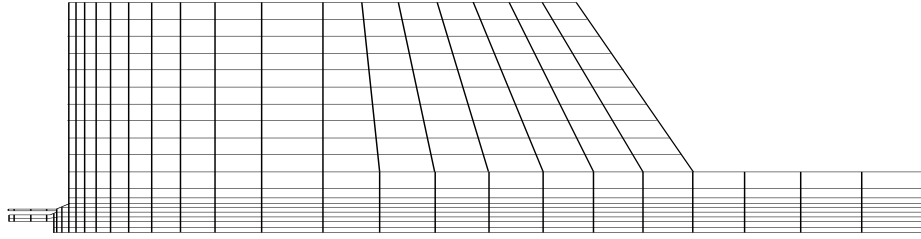


Figura 6.2: Malha análoga às usadas na simulação da câmara do BERL mas com uma menor densidade de nós.

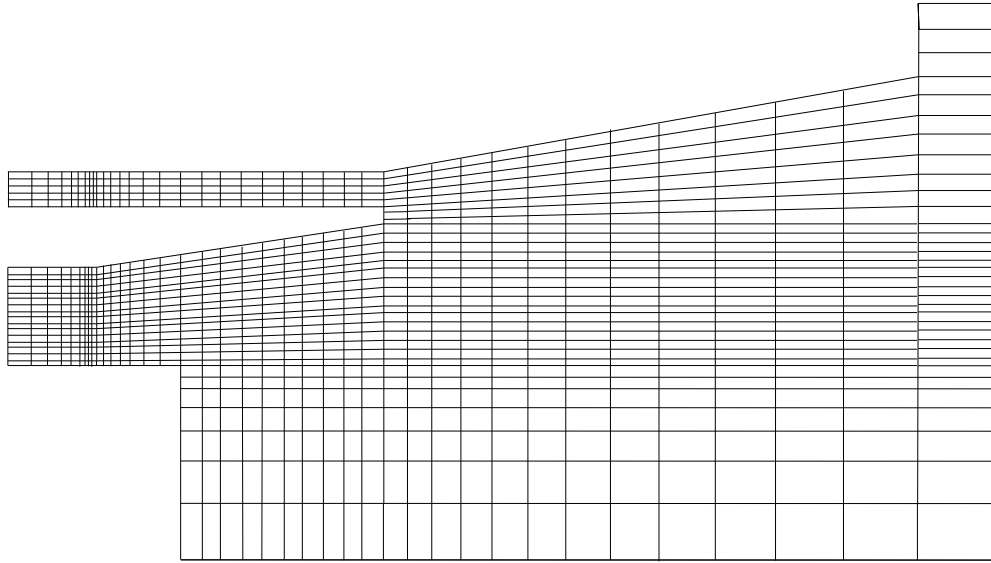


Figura 6.3: Detalhe de uma malha com 155×60 nós utilizada nas simulações.

A discretização das equações de transporte foi efectuada pelo método dos volumes finitos em malhas não ortogonais ajustadas às fronteiras. O cálculo dos fluxos convectivos é feito usando os esquemas híbrido e *MUSCL*.

A secção do corpo principal da câmara é octogonal, pelo que em rigor se deveria usar a correspondente geometria tridimensional para a discretização do domínio espacial. Como sugerido por [Kaufman *et al.*, 1994], uma geometria com simetria cilíndrica é uma aproximação razoável e permite a utilização de malhas bidimensionais, como a usada nesta simulação. Nos cálculos bidimensionais como os efectuados, os 24 orifícios de entrada do combustível são modelados como uma fenda de 0.339mm de largura, cuja área equivale à do conjunto de orifícios.

As malhas utilizadas têm 155×60 e 300×120 nós e uma geometria análoga à da figura 6.2, que mostra a variação da densidade da malha e das formas dos volumes de controlo. Para clareza de visualização, a malha é representada nesta figura com um número de nós inferior ao efectivamente utilizado. O detalhe da malha de 155×60 na zona do queimador é representado na figura 6.3.

6.2.2 Composição das *flamelets* laminares

As propriedades das *flamelets* laminares utilizadas no modelo de interacção da turbulência com as reacções químicas são calculadas como solução das equações (3.20) e (3.21).

O domínio Z ($\equiv [0, 1]$) foi discretizado numa malha de 100 nós equidistantes e as equações referidas discretizadas por métodos análogos aos descritos no capítulo 4.

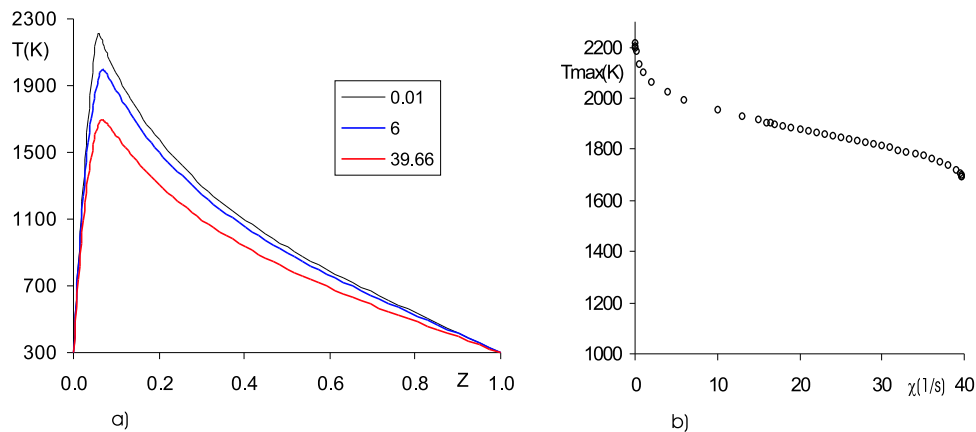


Figura 6.4: a) Perfis de temperatura em função de Z para os valores de $\chi = 0.01$; 6; 39.66s^{-1} ; b) Temperaturas máximas em função de χ .

A taxa de dissipação escalar foi considerada constante em cada cálculo. Ao parâmetro χ foram atribuídos 43 valores diferentes entre $\chi = 0.01 \text{ s}^{-1}$ e $\chi = 40 \text{ s}^{-1}$ (ver por exemplo figura 6.4b em que os valores de χ são representados de forma discreta). Este valor de χ é superior ao valor de extinção χ_q . Para cada valor de χ foram determinados os perfis da temperatura e fracções mássicas das espécies químicas intervenientes no mecanismo químico considerado (tabela 3.2).

As fracções mássicas e temperatura em $Z = 0$ e $Z = 1$ são especificados como as condições de fronteira nas alimentações de oxidante e combustível do queimador, respectivamente.

Para $\chi > \chi_q$, os perfis calculados das variáveis dependentes são lineares em função de Z e independentes de χ por se tratar de uma mistura não reactiva entre o combustível e o oxidante.

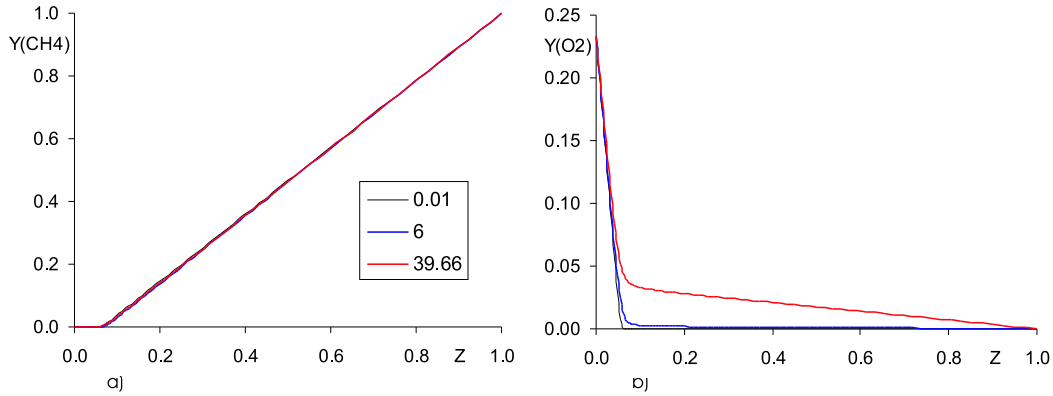


Figura 6.5: Perfis das fracções mássicas em função de Z para valores de $\chi = 0.01$; 6; 39.66 s^{-1} . a) CH_4 ; b) O_2 .

Na figura 6.4 são representados os perfis calculados da temperatura e fracções mássicas como função de Z para diversos valores de χ e da temperatura máxima de cada *flamelet* em função de χ . Observa-se a diminuição dos valores da temperatura das *flamelets* com o aumento dos valores da taxa de dissipação escalar, até à extinção da *flamelet* para valores muito próximos de $\chi = 39.67 \text{ s}^{-1}$, em que a temperatura se torna uma função linear de Z . Os valores máximos de T encontram-se em valores de Z levemente superiores a Z_{est} cujo valor, para a reacção entre metano e ar, é $Z_{est} \simeq 0.055$. Com a variação de χ ,

a posição dos máximos sofre pequenas variações, aproximando-se de Z_{est} quando $\chi \rightarrow 0$.

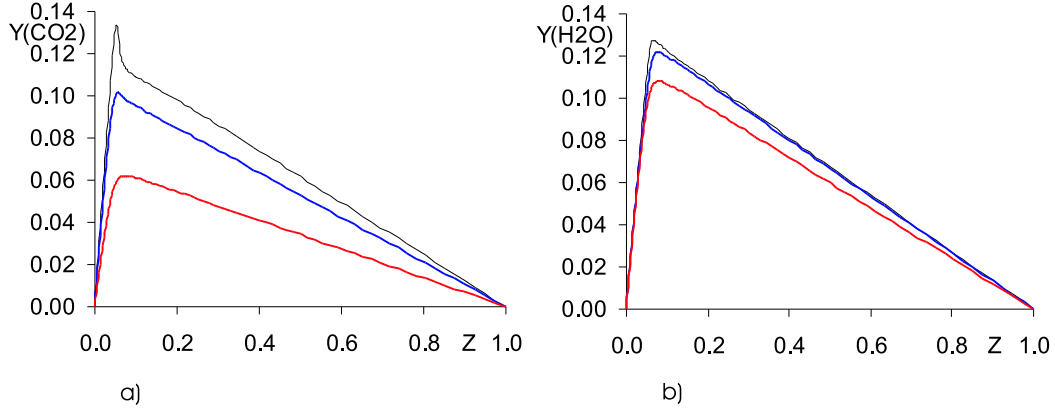


Figura 6.6: Perfis das fracções mássicas em função de Z para valores de $\chi = 0.01; 6; 39.66 \text{ s}^{-1}$. a) CO_2 ; b) H_2O .

A figura 6.5 mostra que as fracções mássicas de metano são praticamente nulas para valores da fracção de mistura $Z < 0.075$ e revelam sensibilidade quase nula aos valores da taxa de dissipação do escalar conservado. Para valores baixos de χ e $Z > Z_{est}$ os valores da concentração de O_2 são praticamente nulos. Para valores de χ próximos da extinção, a presença de metano não inibe completamente a existência de oxigénio.

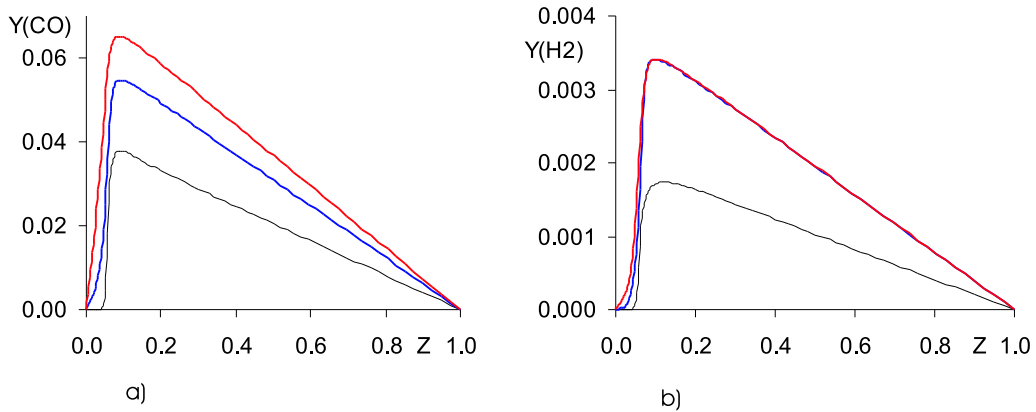


Figura 6.7: Perfis das fracções mássicas em função de Z para valores de $\chi = 0.01; 6; 39.66 \text{ s}^{-1}$. a) CO ; b) H_2 .

Os perfis da fracção mássica de CO_2 (figura 6.6) indicam a existência de máximos para valores de Z muito próximos de $Z = Z_{est}$, particularmente para os valores de χ próximos da condição de equilíbrio químico, caso em que o máximo em $Z = Z_{est}$ se destaca significativamente. A variação dos valores de χ tem um efeito relativamente pequeno sobre os perfis de $Y_{H_2O}(Z)$, ao contrário do que sucede no caso do dióxido de carbono.

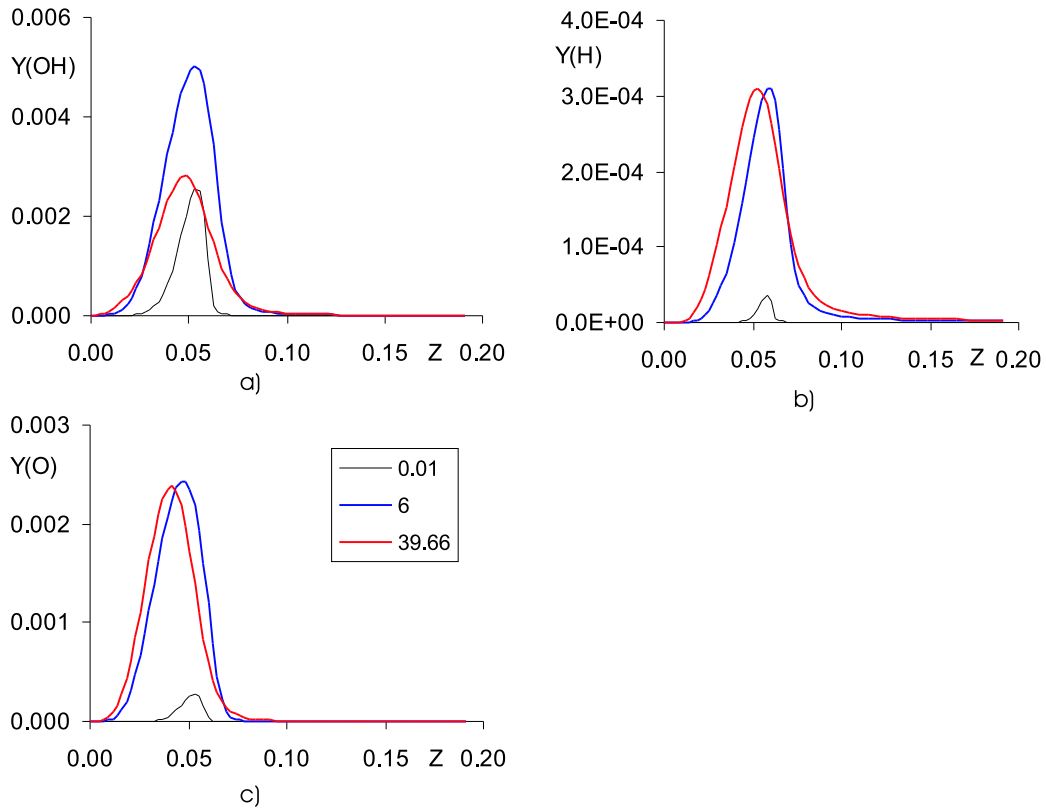


Figura 6.8: Perfis das fracções mássicas em função de Z para valores de $\chi = 0.01$; 6; 39.66 s^{-1} . a) OH ; b) H ; c) O .

A figura 6.7 mostra que os máximos da concentração de CO se encontram do lado rico da flamelet em valores de $Z \simeq 0.08$ e, ao contrário do que sucede com o dióxido de carbono, aumentam com χ . Para valores de χ próximos do equilíbrio químico, a concentração de CO é muito baixa na região pobre da *flamelet* ($Z < Z_{est}$), estando a fracção mássica do elemento carbono associada quase exclusivamente ao dióxido de carbono. As fracções mássicas de H_2 são uma ordem de grandeza abaixo das de CO

e apresentam perfis análogos aos desta espécie. Só para valores de χ muito baixos as concentrações de H_2 se aproximam de zero.

As fracções mássicas dos radicais OH , H e O apresentam valores máximos em valores de Z próximos de Z_{est} (ver figura 6.8). Próximo da condições de equilíbrio químico, as fracções mássicas de H e O tomam valores muito baixos.

Os resultados obtidos para a estrutura das *flamelets* são semelhantes aos de [Chan *et al.*, 1998].

6.2.3 Resultados e discussão

[Kaufman *et al.*, 1994] apresentam resultados experimentais das seguintes variáveis: componentes axial e tangencial da velocidade, temperatura e fracções molares. Nesta subsecção, estes resultados são comparados com valores obtidos em simulações numéricas baseadas nos modelos apresentados nos capítulos 3 e 4.

Em primeiro lugar serão apresentados os campos de algumas variáveis, essencialmente na forma de isolinhas, em todo o domínio ou em sub-domínios de cálculo. Estes resultados numéricos serão usados para análise do comportamento do sistema em combustão turbulenta, e também para análise da influência dos modelos usados sobre os resultados obtidos.

Seguidamente, será feita a comparação entre resultados experimentais e numéricos e analisadas as causas de algumas discrepâncias.

Os campos da velocidade, temperatura e composição química estão fortemente correlacionados por intermédio dos fenómenos de transporte, efeitos térmicos das reacções químicas e propriedades físicas do gás, pelo que não é fácil separá-los na análise de resultados. Na modelação que serviu de base às simulações numéricas, são calculadas algumas grandezas para as quais não existem dados experimentais disponíveis. Além da pressão, é o caso da fracção de mistura, variância da fracção de mistura e taxa de dissipação escalar. Os valores numéricos destas grandezas são também utilizados na interpretação dos resultados, o mesmo sucedendo com as variáveis das *flamelets* laminares, apresentadas na subsecção anterior.

Os resultados experimentais de [Kaufman *et al.*, 1994] são apresentados na forma de perfis radiais de diversas grandezas em 5 planos perpendiculares ao eixo de simetria, lo-

calizados em $x = 27, x = 109, x = 191, x = 343, x = 432\text{mm}$, em que $x = y_1 - 0.195\text{m}$ (ver figura 6.10). Para as componentes da velocidade, o plano $x = 191\text{mm}$ é substituído pelo plano $x = 177\text{mm}$. Os resultados numéricos obtidos com vários submodelos no presente trabalho são comparados com os experimentais nos mesmos planos.

Os esquemas convectivos híbrido e MUSCL são designados pelas siglas HIB e MU, respectivamente. Os modelos de turbulência $k - \varepsilon$ na versão clássica e com utilização da teoria do grupo de renormalização são designados respectivamente por KE e RNG. Os resultados obtidos numa malha de 155×60 nós são designados por 155, enquanto os restantes foram obtidos usando malhas de 300×120 nós.

Tal como os resultados experimentais apresentados em [Kaufman *et al.*, 1994], os resultados da composição química são apresentados em gráficos das fracções molares das espécies químicas em base seca (com exclusão do conteúdo em H_2O):

$$X_k = \frac{Y_k}{M_k \cdot \sum_i \frac{Y_i}{M_i}}, \quad (6.3)$$

em que M_k é a massa molar da espécie k e o somatório se estende a todas as espécies da mistura com excepção de H_2O .

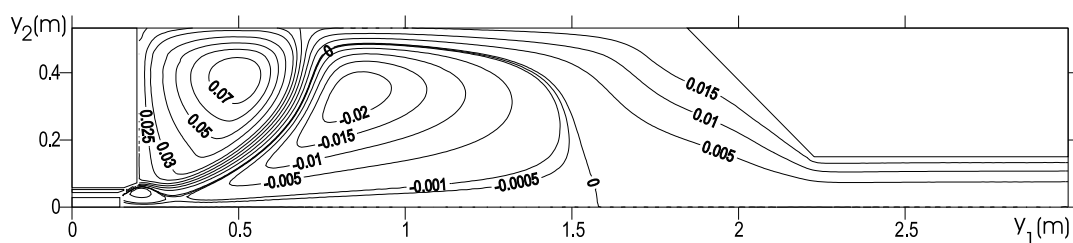


Figura 6.9: Linhas de corrente do escoamento sem reacção química.

Foi inicialmente efectuada a simulação dum escoamento isotérmico de ar à temperatura de 300K com as mesmas velocidades de entrada utilizadas no caso reactivo. A figura 6.9 mostra, tal como no caso apresentado na subsecção 5.4.2, a existência de uma zona de recirculação toroidal na intersecção entre a parede cilíndrica e o plano de entrada, assim como uma grande recirculação junto ao eixo. À saída do queimador existe uma zona de recirculação de pequenas dimensões. As linhas de corrente da figura 6.9 são calculadas

pela equação (6.4). Tratando-se de um escoamento incompressível, as linhas de corrente não se distinguem na forma em relação às obtidas com base na equação (5.12).

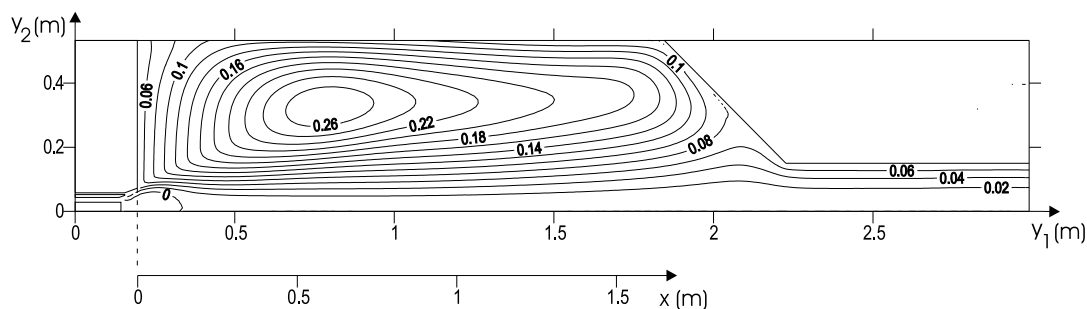


Figura 6.10: Linhas da função corrente, baseadas na equação (5.12), do escoamento com combustão.

A figura 6.10 representa a função corrente do escoamento com combustão. Em relação ao caso não reactivo, verificam-se alterações em propriedades do fluido com efeito sobre o escoamento. A viscosidade laminar e a massa volúmica são agora variáveis, apresentando a massa volúmica variações na proporção de 1 para 6 em percursos muito curtos da ordem de 10cm na direcção do escoamento, sendo os gradientes na direcção transversal ainda mais elevados. A alteração destas propriedades tem efeitos no campo da pressão e das tensões viscosas, podendo alterar o padrão do escoamento como sucede neste caso.

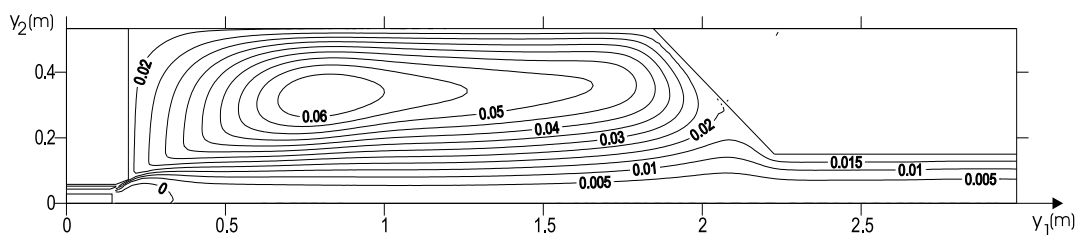


Figura 6.11: Linhas da função corrente ponderada pela massa.

As linhas de corrente representadas na figura 6.11 são determinadas por equações análogas às equações (5.12), mas em que as componentes u_i da velocidade são substituídas por ρu_i :

$$\rho u_1 = \frac{1}{y_2 \delta \theta} \frac{\partial \Psi_m}{\partial y_2}; \quad \rho u_2 = -\frac{1}{y_2 \delta \theta} \frac{\partial \Psi_m}{\partial y_1}. \quad (6.4)$$

A função corrente assim definida, designada por Ψ_m , tem unidades kg/s e permite mostrar as linhas de transporte de massa. A função de corrente definida pela equação (5.12) não é conservativa da massa, como pode verificar-se por análise da equação (2.11) de conservação da massa ou por intermédio da figura 6.10, que mostra a existência de isolinhas de fronteira não paralelas a paredes impermeáveis.

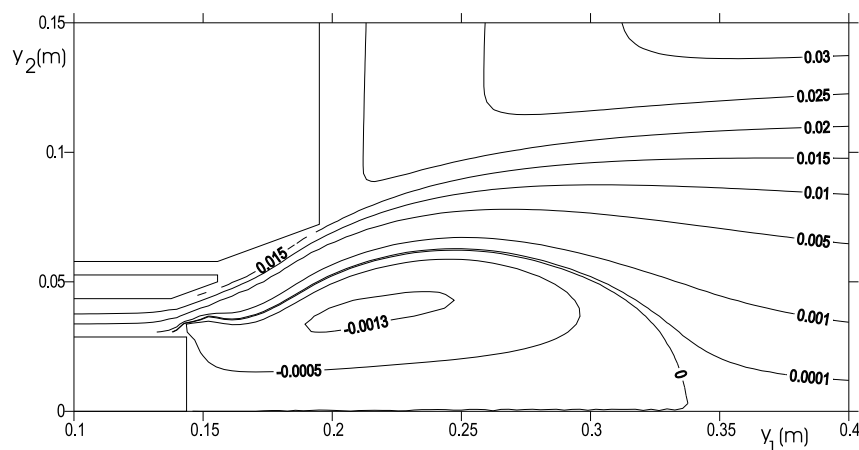


Figura 6.12: Detalhe do escoamento na saída do queimador.

As figuras 6.11 e 6.12 mostram o padrão geral calculado do escoamento reactivo na câmara de combustão. O escoamento pode ser considerado dividido em zonas convectivas com características próprias que possibilitam a sua identificação e descrição simples. Assim, identifica-se a existência de um jacto de ar com *swirl*, no interior do queimador a montante da alimentação de combustível. Na proximidade desta alimentação, o ar e o combustível difundem-se, passando o jacto a incluir zonas com concentrações de combustível que variam de zero a montante da alimentação de combustível até valores elevados na vizinhança desta alimentação. A jusante da saída do queimador, o jacto mantém a forma anelar imposta pela geometria do queimador e os valores da velocidade mantêm-se muito elevados, distinguindo-se das zonas vizinhas. Devido à dispersão do jacto, o perfil radial de velocidades torna-se progressivamente mais uniforme para jusante (perde-se portanto a característica de jacto), saindo finalmente o fluido pela conduta de exaustão. Junto ao eixo na zona de saída do queimador existe uma zona de recirculação interna (ZRI) com dimensão axial de aproximadamente 20cm e 13cm de diâmetro máximo. Exteriormente

ao jacto proveniente do queimador e à zona de convecção que se escoará pela conduta de exaustão, existe uma zona de recirculação externa (ZRE) que ocupa o volume restante da câmara de combustão.

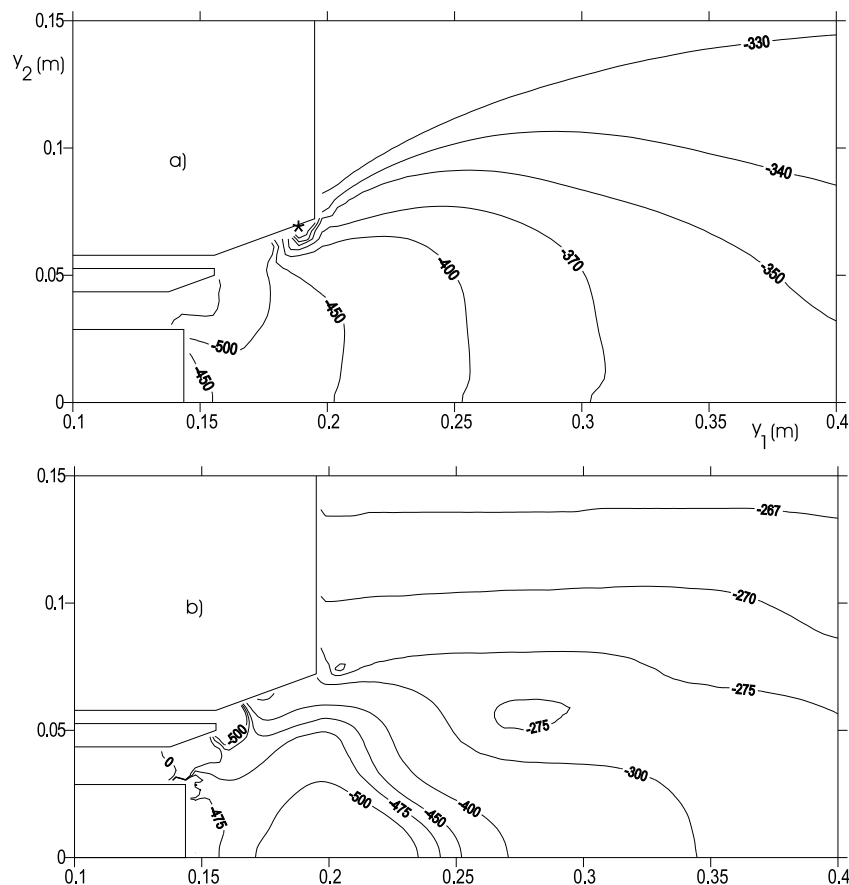


Figura 6.13: Isobáricas (Pa) na zona de saída do queimador em escoamentos: a) com reacção química ; b) sem reacção química.

A figura 6.13 mostra as isobáricas na zona de saída do queimador. À expansão do jacto correspondem, nos casos reactivo e isotérmico, componentes axiais positivas do gradiente de pressão.

A deflexão centrífuga do jacto, observada imediatamente após a saída da conduta das alimentações, é devida ao movimento de rotação do fluido. A rápida expansão provocada pela combustão na zona em que $x < 0$ conduz ao aumento da pressão na proximidade das paredes, contribuindo para a diminuição do gradiente axial da pressão na zona

de expansão térmica. Nesta zona o gradiente de pressão junto à parede cónica é elevado, particularmente na zona centrada em $(y_1, y_2) \simeq (0.188, 0.0695)$, assinalada com * na figura 6.13a.

Para $x > 0$, na zona de fronteira do jacto com o escoamento de retorno da ZRE, o fluido em movimento radial centrípeto sofre, por parte do fluido do jacto, uma força viscosa com componentes axial e radial positivas, originando a curvatura das linhas de corrente médias que se observa nessa zona da ZRE. Por sua vez, na zona de fronteira referida, a componente radial do gradiente de pressão é positiva o que, na ausência de outras forças e *swirl*, provocaria uma aceleração centrípeta do jacto. Tal ocorre efectivamente no caso reactivo, em que o gradiente centrípeto nesta zona é bastante superior ao verificado no caso isotérmico. O gradiente centrípeto da pressão mantém-se elevado superando o efeito centrífugo da rotação do fluido, contribuindo para a deflexão centrípeta do jacto com a correspondente curvatura em direcção ao eixo. A incidência radial do fluido da ZRE sobre o jacto axial contribui para manter o gradiente centrípeto de pressão sobre o jacto numa zona mais extensa que no caso isotérmico.

No caso isotérmico, o gradiente centrípeto da pressão, não é suficientemente elevado para provocar a deflexão centrípeta do jacto com *swirl*. A recirculação, que no caso isotérmico estava limitada pela parede de fundo da câmara em $x = 0$ (ver figura 6.1) e a parede cilíndrica, estende-se agora a toda a dimensão axial desta, sendo limitada também pela parede cónica da câmara. Os dados experimentais da velocidade disponíveis, embora escassos para valores de $y_2 > 0.2m$, são compatíveis com os resultados numéricos que prevêm a existência da ZRE ocupando quase toda a câmara, com velocidades relativamente baixas quando comparadas com as do jacto de entrada.

Com o aumento da dimensão da ZRE no caso reactivo em relação ao isotérmico, a recirculação existente no escoamento isotérmico junto ao eixo e não limitada directamente por paredes não está presente no escoamento reactivo.

Mantém-se a zona de recirculação interna (ZRI) na proximidade do queimador, com características análogas à existente no caso isotérmico. O jacto anelar proveniente do queimador transfere, por difusão turbulenta, momento linear para o fluido localizado entre o eixo e o mesmo jacto. O gradiente axial de pressão adverso, que está associado com a diminuição de velocidade na zona de expansão do jacto a jusante do queimador, provoca a desaceleração do fluido o que, na zona de baixa velocidade junto ao eixo, conduz

à inversão do sentido da velocidade, provocando a existência de uma pequena ZRI situada na extremidade plana do queimador.

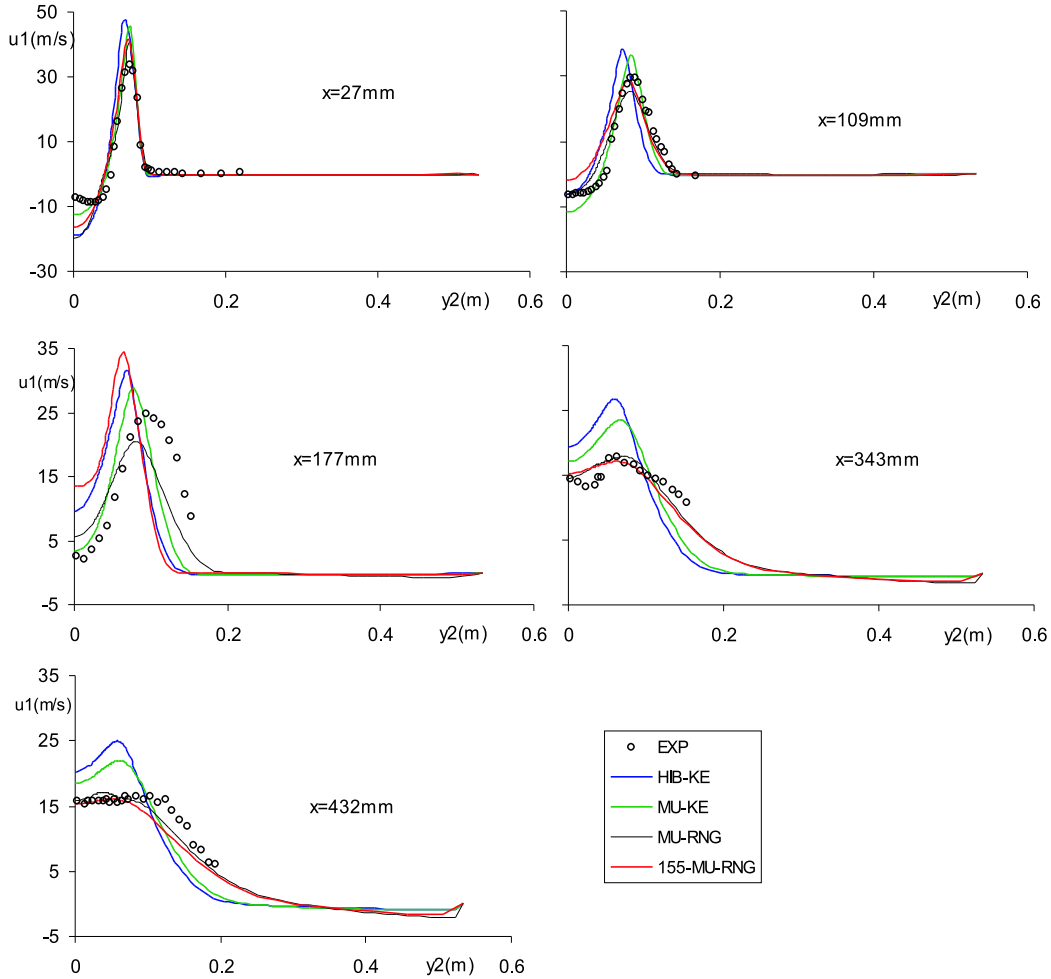


Figura 6.14: Perfis radiais experimentais e calculados da componente axial da velocidade em diferentes valores da coordenada axial.

Os resultados numéricos e experimentais da componente axial da velocidade média, \widetilde{u}_1 , em função da coordenada radial em vários planos x são apresentados na figura 6.14.

Em $x = 27mm$ (ou $y_1 = 195 + 27mm$) os dados experimentais indicam uma menor velocidade de retorno na ZRI junto ao queimador do que a prevista pelos resultados

numéricos. A posição do jacto proveniente do queimador é reproduzida com boa precisão, mas o pico da velocidade prevista é superior ao experimental. Tanto as previsões numéricas como os dados experimentais indicam velocidades muito baixas na ZRE.

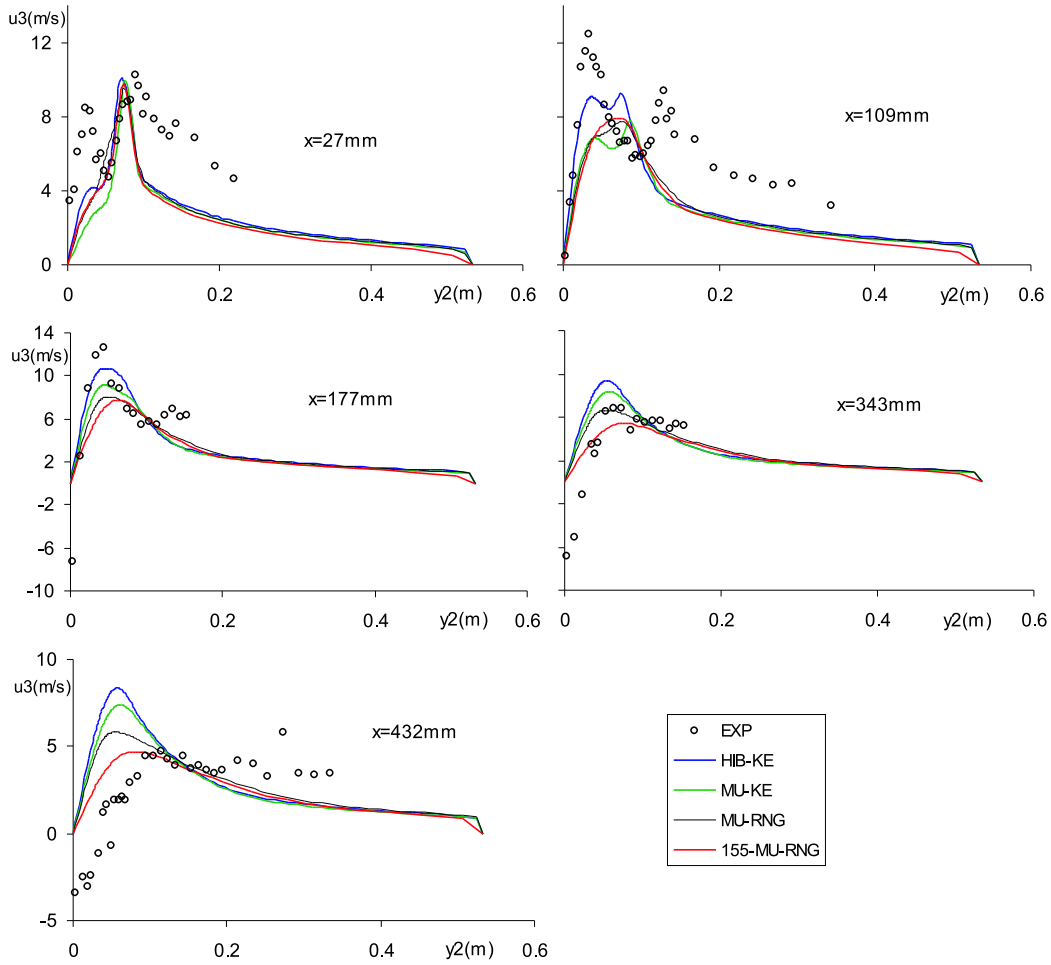


Figura 6.15: Perfis radiais experimentais e calculados da componente tangencial da velocidade em diferentes valores da coordenada axial.

A comparação dos resultados nos vários planos x revela que as previsões apresentam uma menor taxa de dispersão do jacto do que as medidas. Estas mostram que, a 30cm a jusante do queimador, o jacto perdeu a sua forma anelar e apresenta uma velocidade uniforme na proximidade do eixo. Estas características dos resultados numéricos poderão

dever-se às características insuficientemente difusivas associadas ao modelo $k - \varepsilon$ de turbulência. As previsões do modelo MU-RNG com malha refinada são as que estão mais próximas dos resultados experimentais. O acordo é relativamente bom, exceptuando-se os resultados em $x = 177mm$, em que o máximo da velocidade do jacto se encontra em posições radiais diferentes nos dados experimentais e nas várias previsões numéricas.

Em $x = 343mm$, os dados experimentais indicam a existência de uma zona perto do eixo em que os valores médios da componente axial da velocidade apresentam um mínimo local com a variação de y_2 . Este mínimo relativo não é previsto pelos cálculos efectuados e poderia corresponder a um desvio do eixo de rotação do fluido em relação ao eixo de simetria da câmara. Um mínimo análogo embora menos acentuado ocorre em $x = 177mm$.

Os perfis calculados da componente tangencial da velocidade média \widetilde{u}_3 , representados na figura 6.15, mostram uma subavaliação de \widetilde{u}_3 na ZRI, não reproduzindo o pico que os dados experimentais exibem em $y_2 \simeq 3cm$, que é no entanto previsto, embora de forma insuficiente, pela versão clássica do modelo $k - \varepsilon$ usando o esquema híbrido.

A existência de valores experimentais de \widetilde{u}_3 negativos, como mostra a figura 6.15, poderá estar relacionada com um eventual posicionamento do eixo do escoamento em posições não coincidentes com o eixo de simetria da câmara. Estando esta posicionada verticalmente ([Kaufman *et al.*, 1994]), não são de esperar assimetrias angulares devidas à impulsão. A existência de assimetrias nos resultados experimentais é evidente nos dados apresentados por [Kaufman *et al.*, 1997] e, no caso não reactivo, por [Fiveland *et al.*, 1996].

Excluindo a existência de valores experimentais negativos de \widetilde{u}_3 , nos planos de medida mais a jusante, o acordo qualitativo com os dados experimentais é razoável, mas há discrepâncias significativas do ponto de vista quantitativo. Este facto não é surpreendente, tendo em vista as deficiências reconhecidas do modelo $k - \varepsilon$ na previsão de escoamentos com rotação. A versão RNG deste modelo não conduz, para o problema em estudo, a melhorias significativas.

A comparação dos resultados das componentes da velocidade obtidos com diversos modelos e malhas revela que a dispersão entre esses modelos é pequena quando comparada com o desvio dos resultados numéricos em relação aos dados experimentais. O mesmo se verifica ocorrer com a generalidade dos estudos consultados, o que sugere uma

insuficiência em alguns dos modelos utilizados, apesar de que as tendências qualitativas das variáveis calculadas sejam geralmente análogas às tendências dos dados experimentais. Num dos modelos utilizados, usando equações estacionárias, [Pember *et al.*, 1996] apresentam resultados em que se verifica a existência de um bom acordo das componentes da velocidade com os resultados experimentais na ZRI.

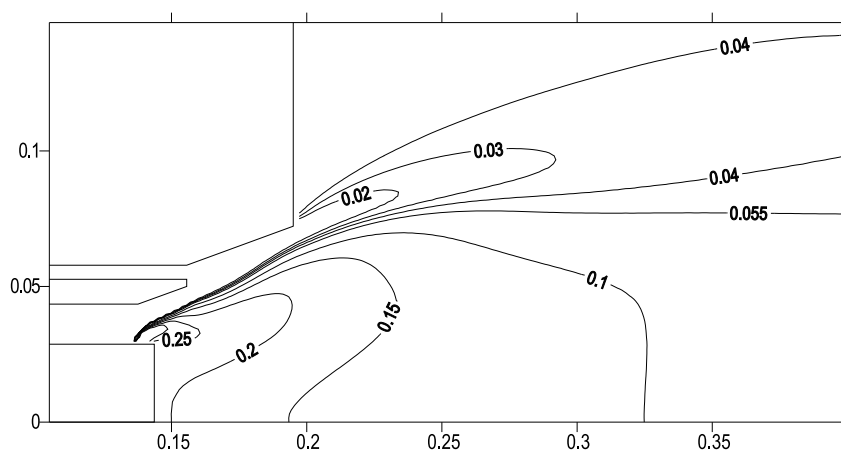


Figura 6.16: Isolinhas da fracção de mistura média na proximidade do queimador.

A composição química e a temperatura da mistura gasosa são fortemente dependentes do valor médio da fracção de mistura, \tilde{Z} . A figura 6.16 mostra as isolinhas de \tilde{Z} . A figura 6.17 representa os perfis radiais calculados da fracção de mistura média em diversos valores da coordenada axial.

Na ZRI e na zona interior do jacto, a fracção de mistura média \tilde{Z} é elevada, enquanto na parte exterior do jacto na proximidade do queimador os valores de \tilde{Z} são baixos, reflectindo o transporte convectivo do fluido proveniente essencialmente da alimentação do oxidante. Na proximidade do queimador no interior do jacto, os valores de \tilde{Z} variam rapidamente desde os valores elevados correspondentes a uma mistura rica proveniente da alimentação de combustível, até valores baixos existentes em valores superiores da coordenada radial y_2 , transportando uma fracção significativa de ar proveniente da alimentação respectiva. Nas zonas afastadas das alimentações, os gradientes de \tilde{Z} são baixos devido ao transporte difusivo turbulento entretanto ocorrido. Na conduta de exaustão e na zona de retorno da ZRE, o fluido apresenta valores de \tilde{Z} aproximadamente iguais a 0.048, valor

correspondente à mistura completa dos caudais de entrada de oxidante e de combustível.

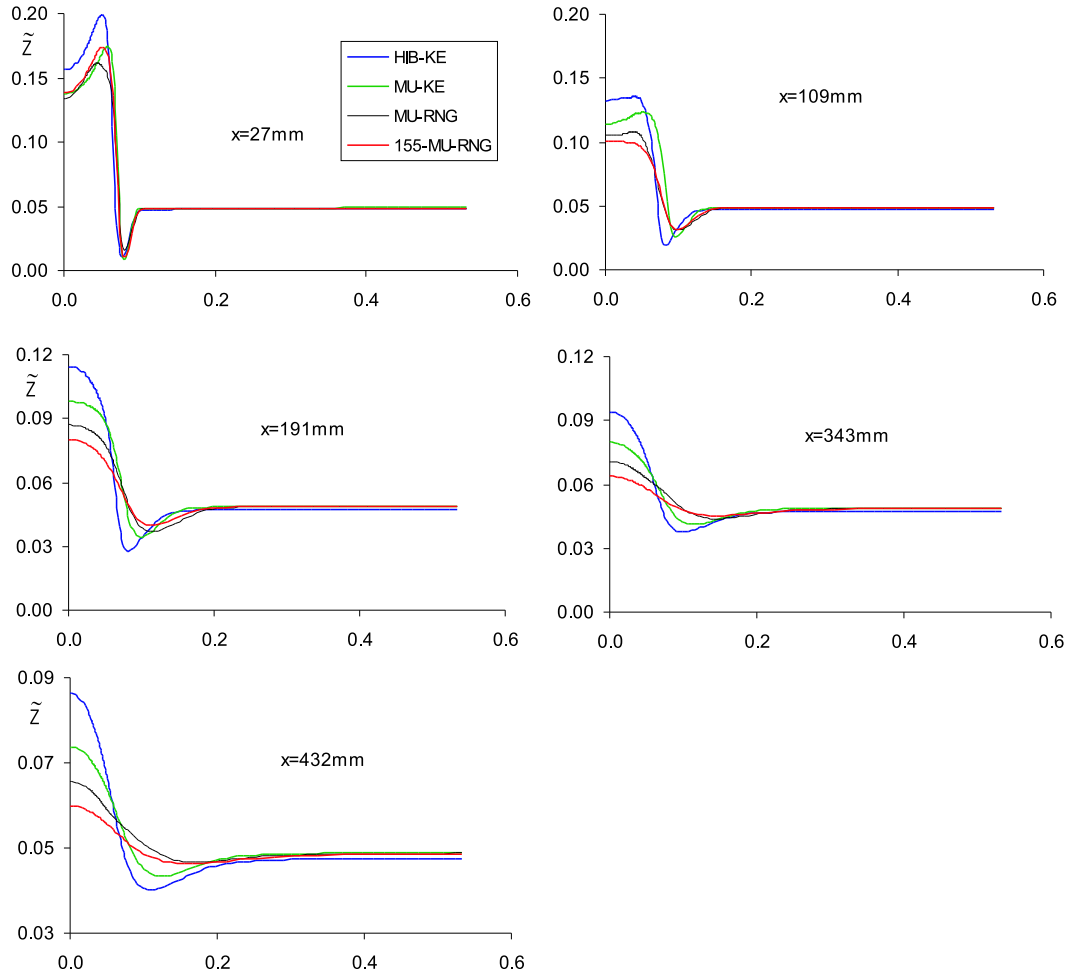


Figura 6.17: Perfis radiais calculados da fracção de mistura média em diferentes valores da coordenada axial.

O esquema HIB-KE com uma malha de 300×120 nós revela menores fluxos de difusão turbulenta do que MU-RNG, estando o modelo MU-KE numa situação intermédia. O efeito do refinamento da malha, que pode ser avaliado comparando os resultados do modelo MU-RNG com 300×120 nós e com 155×60 nós, é relativamente pequeno, apesar de a difusão turbulenta ser ligeiramente superior para a malha de 155×60 nós.

A figuras 6.18 e 6.19 mostram as isotérmicas calculadas usando o modelo HIB-

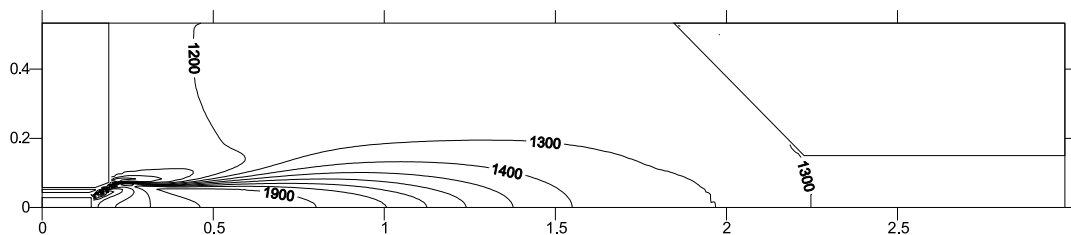


Figura 6.18: Isotérmicas (temperatura expressa em K) calculadas usando o modelo $HIB-k-\varepsilon$.

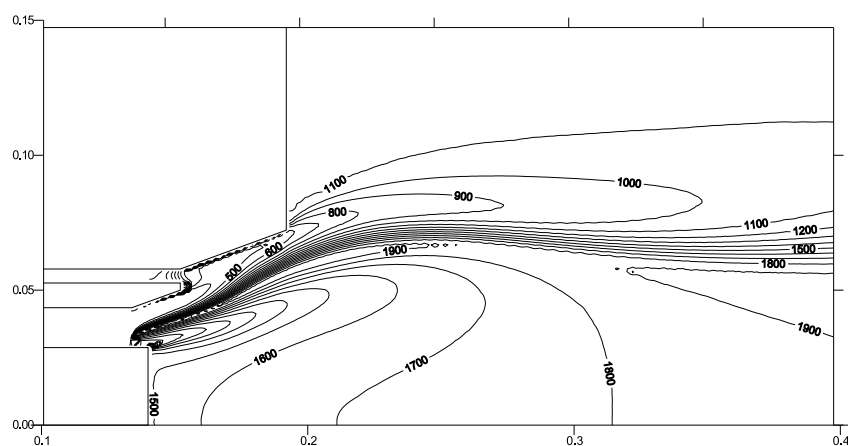


Figura 6.19: Isotérmicas (K) na zona de saída do queimador.

KE. As linhas de \widetilde{Z}''^2 e $\widetilde{\chi}$ constantes são representadas nas figuras 6.20 e 6.21.

A superfície de máxima temperatura encontra-se próxima da superfície de estequiometria, do lado rico da chama.

A variância da fracção de mistura só apresenta valores elevados junto das alimentações. Nas zonas em que \widetilde{Z}''^2 é elevado, os valores calculados de \widetilde{Y}_k podem afastar-se significativamente dos valores de $Y_k(\widetilde{Z})$ determinados pelo modelo das *flamelets*, caso os valores instantâneos de Y_k variem rapidamente com Z , como sucede próximo de Z_{est} . Fora destas zonas, os valores de \widetilde{Y}_k podem ser estimados directamente a partir dos dados $Y_k(Z, \chi)$ das *flamelets* com $(Z, \chi) \simeq (\widetilde{Z}, \widetilde{\chi})$.

Na proximidade do queimador, os valores de $\widetilde{\chi}$ são elevados ($> \chi_q$) pelo que a ignição da chama se verifica apenas a distâncias curtas a jusante. Nas zonas em que $\widetilde{\chi} > \chi_q$,

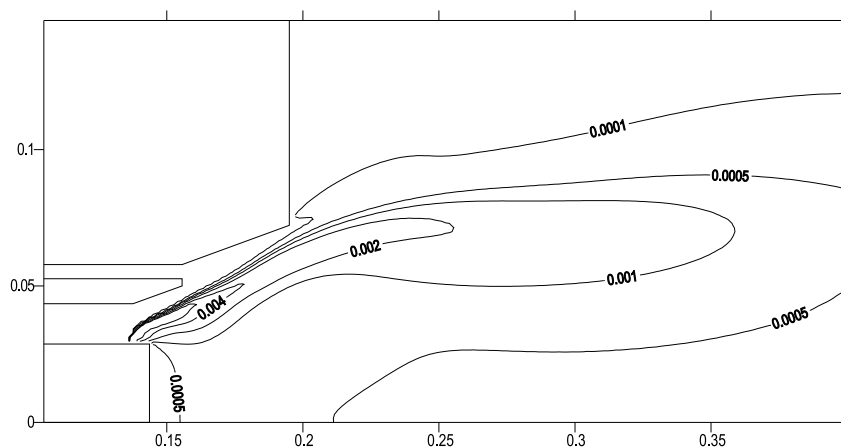


Figura 6.20: Isolinhas da variância da fracção de mistura na proximidade do queimador.

os valores médios das fracções mássicas são calculados a partir das *flamelets* instantâneas extintas (nomeadamente as *flamelets* em que $\chi = 40s^{-1}$), efectuando as médias de Y_k ponderadas por $\tilde{P}(Z)$. Na prática (tal como para as *flamelets* em combustão) não se efectua a média no espaço dos χ por se considerar que a função densidade de probabilidade de χ é um delta de Dirac centrado em $\tilde{\chi}$.

Os resultados experimentais da temperatura, figura 6.22, mostram existir, no plano $x = 27mm$, uma pequena variação da temperatura para os valores de y_2 correspondentes à ZRI e à parte do jacto proveniente do queimador com menores valores de y_2 , onde a fracção mássica de combustível é elevada. Com o aumento de y_2 , num pequeno intervalo de y_2 os valores da temperatura descem abruptamente de $2000K$ para $600K$. Esta última temperatura corresponde à zona em que o jacto saído do queimador apresenta uma composição pobre, facto que os cálculos reproduzem com bastante fidelidade.

O gradiente da temperatura na parede é maior nos dados experimentais que nos correspondentes numéricos. Este facto está relacionado com as características do modelo radiativo. De facto, o modelo utilizado ignora a absorção de energia radiativa no meio, o que implica uma maior perda de energia por radiação. Daqui resulta que a temperatura do meio na ZRE é mais baixa do que a medida, pelo que a diferença entre a temperatura do meio e a temperatura da parede é também menor.

O campo da temperatura calculada pode ser explicado com base no campo da

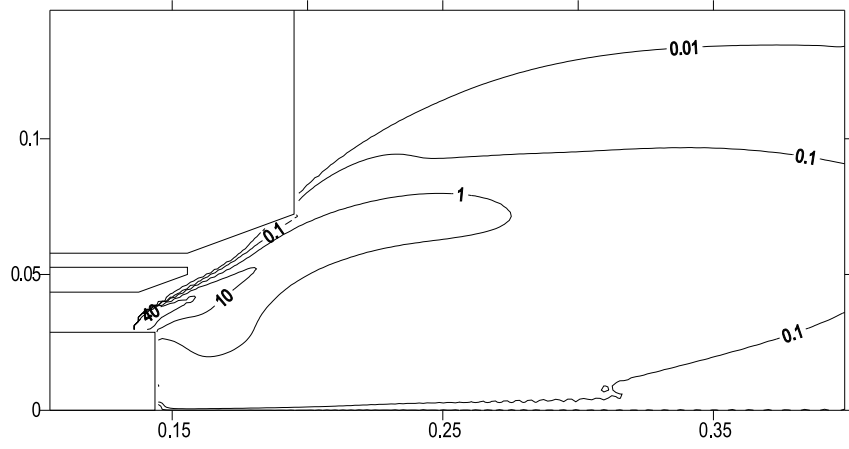


Figura 6.21: Isolinhas da média da taxa de dissipação escalar (s^{-1}).

fracção de mistura anteriormente analisado. Os resultados numéricos relativos ao plano $x = 27mm$ na zona de recirculação interna apresentam um perfil de \tilde{Z} variando entre valores inferiores a 0.15 até valores que se aproximam de 0.2 localizados em $y_2 \simeq 5cm$. Para estes valores excessivamente ricos, as temperaturas instantâneas calculadas pelo modelo de *flamelets* estão entre $1500K$ (HIB-KE) e $1700K$ (MU-RNG) (figuras 6.4, 6.16, 6.21). Para valores de $y_2 \simeq 7cm$, os valores da fracção de mistura aproximam-se de \widetilde{Z}_{est} , conduzindo ao pico de $2000K$ compatível com os valores de \widetilde{Z}''^2 e de $\tilde{\chi}$ calculados nessa zona. Para valores de $y_2 \simeq 8cm$, a composição é pobre com valores de \tilde{Z} inferiores a 0.02, sendo a temperatura média calculada por intermédio das *flamelets* muito baixa.

Para valores de $y_2 \gtrsim 10cm$, a composição química e a temperatura são determinadas pelos valores de $\tilde{Z} \simeq 0.048$, acompanhados de valores muito baixos de \widetilde{Z}''^2 e de $\tilde{\chi}$. As temperaturas previstas pelas *flamelets* seriam inferiores mas próximas de $2100K$. As equações das *flamelets* foram no entanto deduzidas para situações sem fonte térmica radiativa e com condução térmica apenas no interior do fluido. O cálculo da temperatura a partir de \tilde{h} incluindo radiação e condução nas fronteiras conduz a temperaturas muito mais baixas. Para $x = 27mm$ e $y_2 < 0.1m$, o cálculo $T(\tilde{h})$ indica valores próximos dos estimados a partir das *flamelets* instantâneas, dado o peso importante da entalpia sensível resultante das reacções químicas em relação ao transporte de entalpia e fontes radiativas, o que não acontece no resto da câmara onde as reacções químicas não são tão intensas.

Nas regiões em que o transporte de entalpia para as paredes (incluindo o transporte radiativo) é importante em relação à entalpia sensível das reacções químicas, a estimativa da temperatura directamente a partir das *flamelets* conduz a resultados pouco realistas.

Em $x = 27mm$, na região $6cm < y_2 < 8cm$, a composição química média do jacto proveniente das alimentações varia abruptamente, com valores de \tilde{Z} variando entre valores superiores a 0.15 e valores próximos de 0.02. Correspondentemente, a temperatura apresenta, em $y_2 \simeq 8cm$, um mínimo relativo acentuado. Nesta zona, a fracção molar de O_2 calculada reproduz com bastante precisão o pico experimental (figura 6.23), confirmando a precisão com que a posição da zona pobre do jacto tinha sido calculada.

Por sua vez, os dados experimentais da concentração de CO_2 (figura 6.24) indicam valores de X_{CO_2} elevados na ZRI e na parte do jacto em que \tilde{Z} é elevado, o mesmo sucedendo com X_{CO} (figura 6.25), sendo praticamente nula a concentração de oxigénio nesta zona. Numa estreita faixa anelar centrada em $y_2 \simeq 8cm$, em que a fracção molar de O_2 é elevada e T apresenta um mínimo pronunciado, as fracções molares de CO e CO_2 são baixas.

Na ZRE, os resultados numéricos indicam a existência de uma oxidação incompleta com um défice relativamente pequeno nas fracções de CO_2 em relação aos valores experimentais, acompanhado de um excesso de CO . Este comportamento poderia relacionar-se com temperaturas baixas comparativamente às experimentais. No modelo utilizado, no cálculo das fracções molares X_k intervêm os perfis instantâneos calculados pelo modelo das *flamelets*, dependentes de Z e χ e, no cálculo das médias, funções dependentes exclusivamente de \tilde{Z} , $\widetilde{Z''^2}$ e $\tilde{\chi}$. As discrepâncias devem portanto ser interpretadas com base no modelo utilizado.

Na ZRE os valores de χ calculados são tipicamente inferiores a $10^{-4}s^{-1}$. No entanto, as tabelas de *flamelets* utilizadas incluem como valor mínimo da taxa de dissipação escalar o valor $\chi = 0.01s^{-1}$. No cálculo de $\widetilde{Y_k}(\tilde{\chi} < 0.01, \tilde{Z}, \widetilde{Z''^2})$, os valores tabelados de $Y_k(\chi < 0.01, Z, Z''^2)$ utilizados em interpolações foram substituídos por $Y_k(\chi = 0.01, Z, Z''^2)$. Cálculos posteriores das *flamelets* com $\chi = 10^{-4}s^{-1}$, resolvendo as equações (3.20) e (3.21), indicam valores das fracções mássicas de monóxido de carbono $Y_{CO}(\chi = 10^{-4}, Z = 0.048) = 1.60 \times 10^{-3}$, enquanto o valor correspondente com $\chi = 0.01s^{-1}$ é $Y_{CO}(\chi = 0.01, Z = 0.048) = 2.62 \times 10^{-3}$. Os valores da fracção mássica de CO_2 não foram significativamente alterados em termos relativos. Conclui-se então que a

utilização de *flamelets* com valores de $\chi < 0.01$ ou a utilização de extrapolações no cálculo de $Y_k(\chi, Z, Z''^2)$ a partir dos valores tabelados conduziria a fracções molares de *CO* mais próximas dos valores experimentais na ZRE (ver figura 6.7).

Em $x = 109mm$, os resultados experimentais mostram que a zona de recirculação interna tem uma temperatura uniforme, o que sucede também com os resultados das simulações. No entanto, os dados experimentais correspondentes ao jacto proveniente do queimador apresentam neste plano um grau de mistura e de reacção química mais completos do que os calculados. Nestes observa-se um mínimo da temperatura em $y_2 \simeq 10cm$, decorrente da existência de baixos valores de \tilde{Z} nessa zona, que está associada à manutenção de gradientes de \tilde{Z} elevados, decorrentes de difusão turbulenta subestimada.

A fracção de mistura média calculada no plano $x = 109mm$ apresenta um perfil qualitativamente análogo ao calculado em $x = 27mm$, com diminuição das amplitudes, mantendo o mínimo relativo em $y_2 \simeq 8cm$. A temperatura calculada com os vários modelos mantém a existência de mínimos e máximos relativos, atenuados, com a excepção dos cálculos com o modelo $k - \varepsilon - RNG$ que prevêem uma temperatura quase uniforme na zona de recirculação junto ao eixo, em acordo razoável com os dados experimentais. Os resultados numéricos da temperatura indiciam um défice nas taxas de mistura das grandezas escalares, quando comparadas com os resultados experimentais. A fracção molar de oxigénio prevista mantém-se demasiadamente elevada, correspondendo ao transporte da composição pobre pelo jacto proveniente da alimentação de oxidante com o correspondente mínimo local da temperatura, não observado experimentalmente.

Em $x = 109mm$, a posição radial do pico da fracção molar de oxigénio calculada com o modelo HIB-KE praticamente não se altera em relação a $x = 27mm$, havendo uma pequena diminuição do valor máximo e um pequeno aumento da sua largura, em consequência da difusão, que no entanto é inferior à indicada pelos dados experimentais. A utilização da versão $k - \varepsilon - RNG$ do modelo de turbulência resulta numa maior aproximação destes resultados numéricos aos experimentais. Os valores numéricos de CO_2 neste plano têm um perfil que se assemelha aos experimentais, no entanto indicando reacção mais incompleta na ZRI, com valores elevados de *CO*, onde experimentalmente se verifica a reacção ser quase completa. Na ZRE, tal como sucedia para o plano $x = 27mm$, os valores de CO_2 são baixos relativamente aos experimentais, enquanto os valores de *CO* experimentais são praticamente nulos, o que não sucede com os calculados, embora estes

assumam valores relativamente pequenos.

No plano $x = 191mm$ não há diferenças significativas relativamente ao que foi observado para $x = 109mm$.

Nos planos de medição em $x = 343mm$ e $x = 432mm$, os dados experimentais revelam uma diminuição progressiva da temperatura no eixo de simetria com o aumento da coordenada axial, verificando-se uma tendência para a homogeneização da temperatura, típica da dispersão de um jacto reactivo. Os resultados das simulações mostram tendências semelhantes, particularmente com o uso da versão RNG do modelo de turbulência $k - \varepsilon$. Os cálculos com a versão clássica do modelo $k - \varepsilon$ mantêm a previsão da existência de uma superfície em que a temperatura apresenta mínimos relativos (embora pouco pronunciados), em contradição com os dados experimentais.

Em $x = 432mm$, os cálculos numéricos mostram uma taxa de mistura pouco intensa, contrariando os resultados experimentais que apresentam uma concentração de O_2 uniforme ao longo do plano. Os resultados numéricos continuam, mesmo a essa distância, a resultar em concentrações reduzidas de oxigénio em $y_2 = 0$, mostrando não existir difusão suficiente em direcção ao eixo de simetria.

Os perfis da fracção molar de CO_2 (figura 6.24) calculados são qualitativamente semelhantes aos perfis experimentais, embora os seus valores estejam sistematicamente previstos por defeito. Os perfis da fracção molar de CO (figura 6.25), por seu turno são previstos em excesso com perfis análogos aos experimentais. Esta oxidação incompleta, prevista inclusivamente no retorno da ZRE, deverá corresponder à utilização, nos cálculos das fracções mássicas médias, de um valor mínimo de $\chi = 0.01s^{-1}$.

Os perfis calculados da fracção molar seca de H_2 são qualitativamente semelhantes aos de CO , inclusive não sendo muito diferentes em termos quantitativos. O mesmo sucede com os dados experimentais das mesmas fracções molares. A diferença mais visível entre os perfis experimentais das fracções do hidrogénio molecular e do monóxido de carbono consiste no consumo mais rápido do hidrogénio com o afastamento em relação ao queimador, tendência que, de forma menos nítida, se observa também nos resultados numéricos.

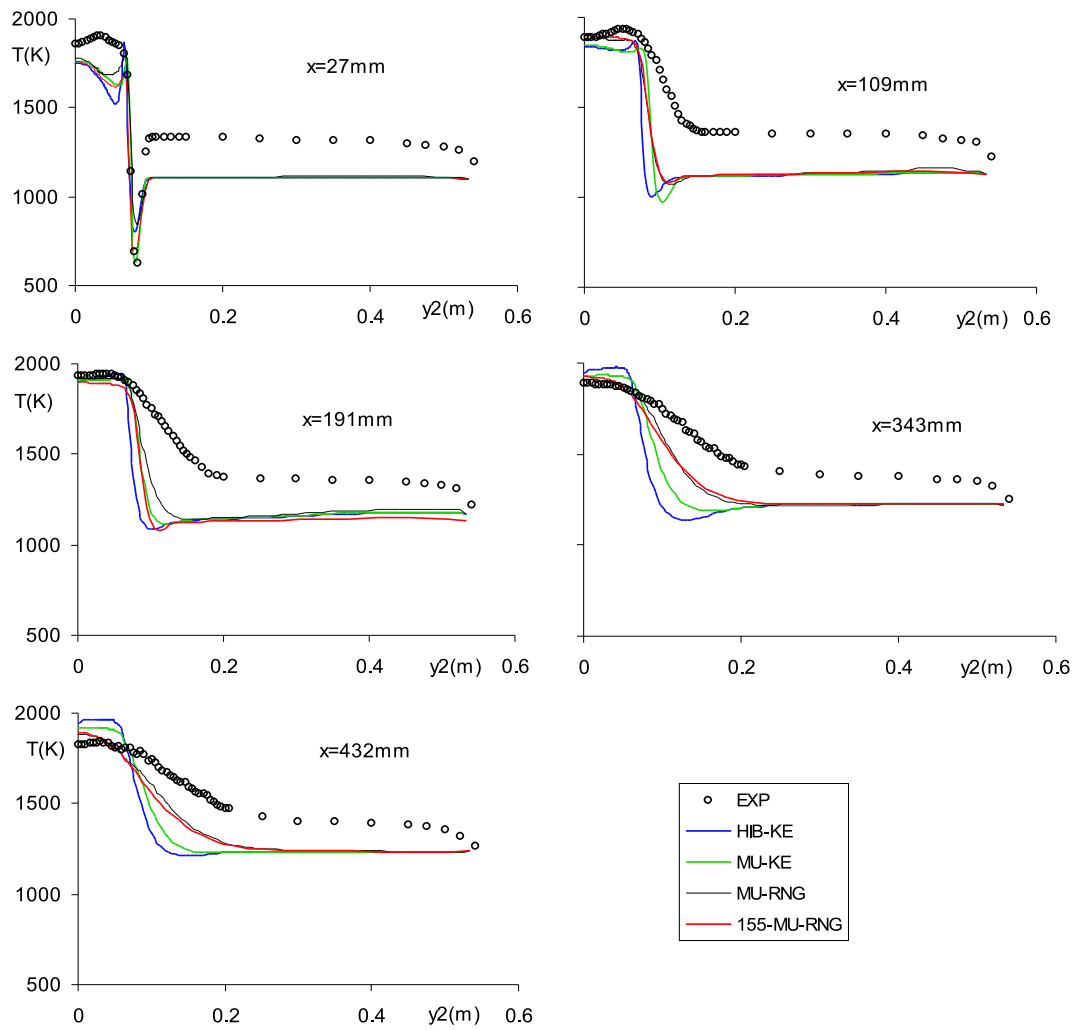


Figura 6.22: Perfis radiais experimentais e calculados da temperatura em diferentes valores da coordenada axial.

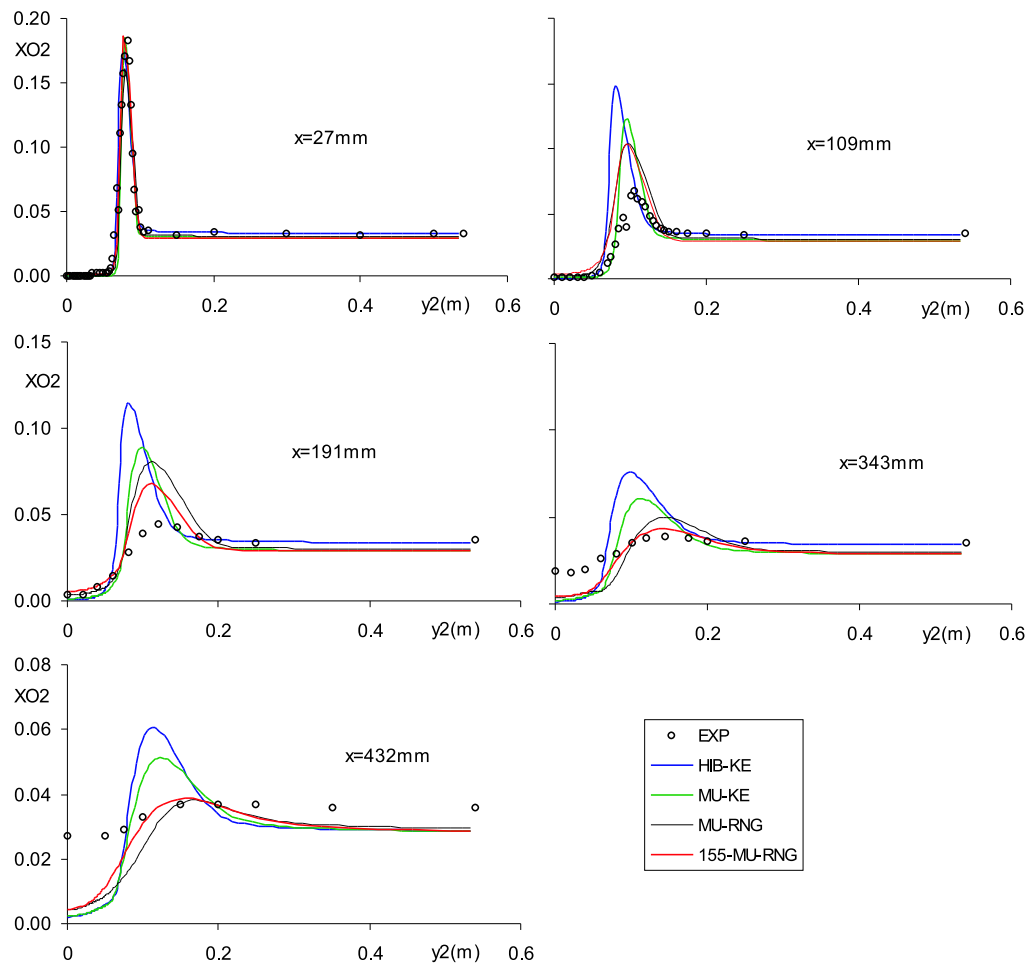


Figura 6.23: Perfis radiais experimentais e calculados da fracção molar seca em diferentes valores da coordenada axial.

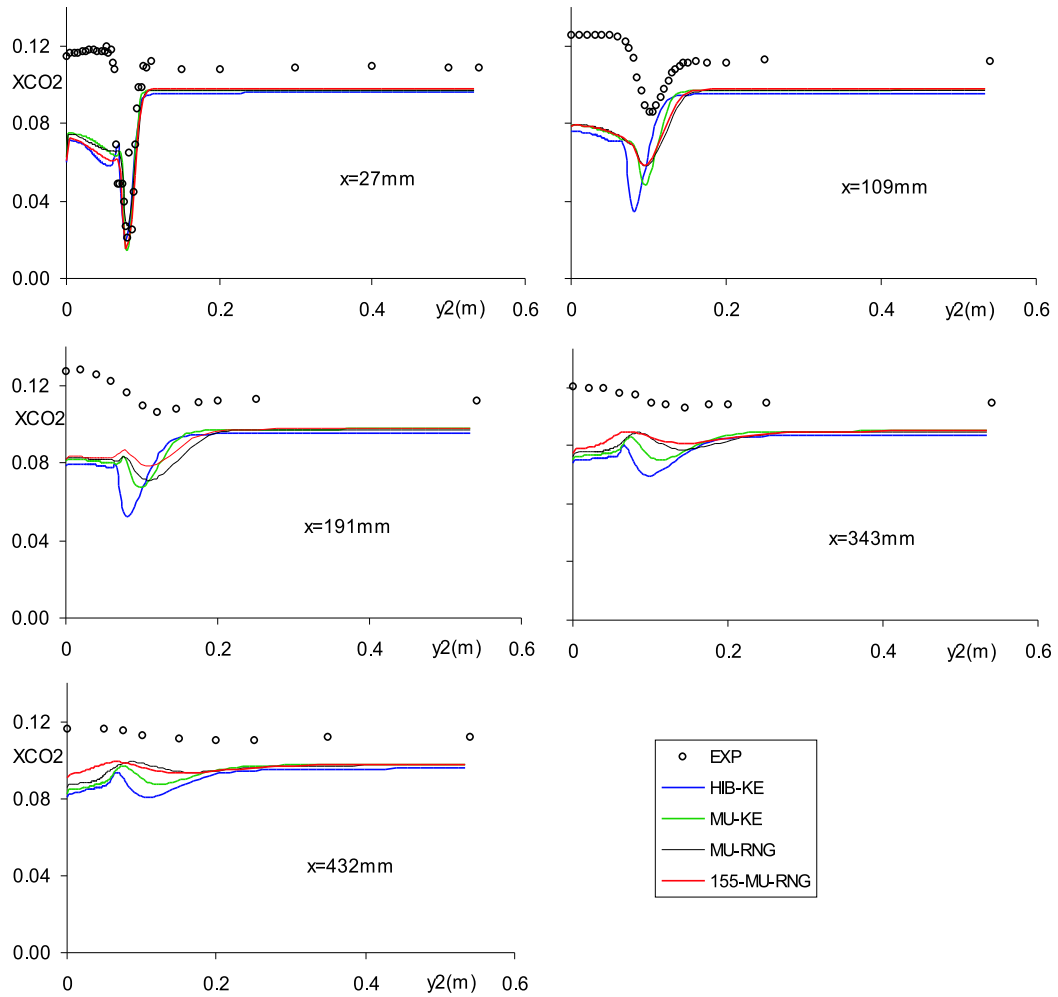


Figura 6.24: Perfis radiais experimentais e calculados da fração molar seca de CO_2 em diferentes valores da coordenada axial.

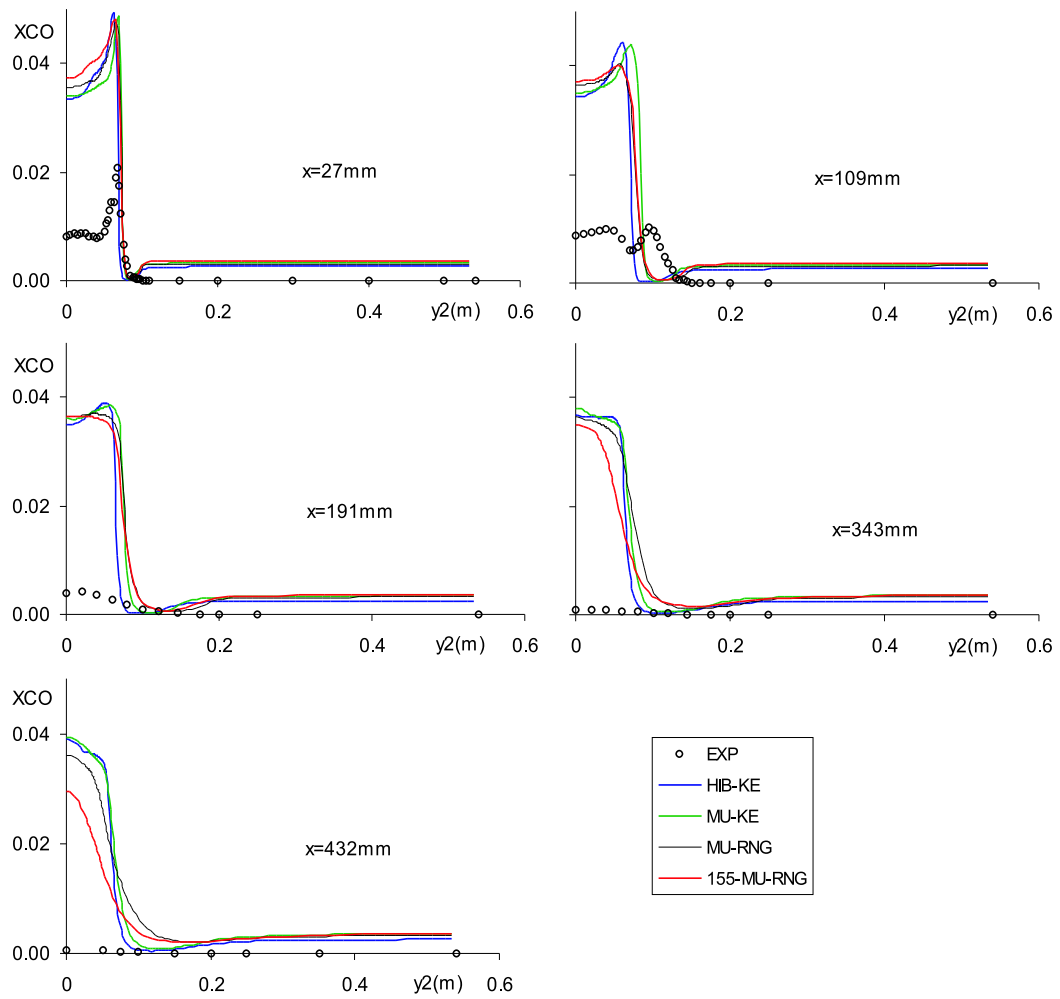


Figura 6.25: Perfis radiais experimentais e calculados da fracção molar seca de CO em diferentes valores da coordenada axial.

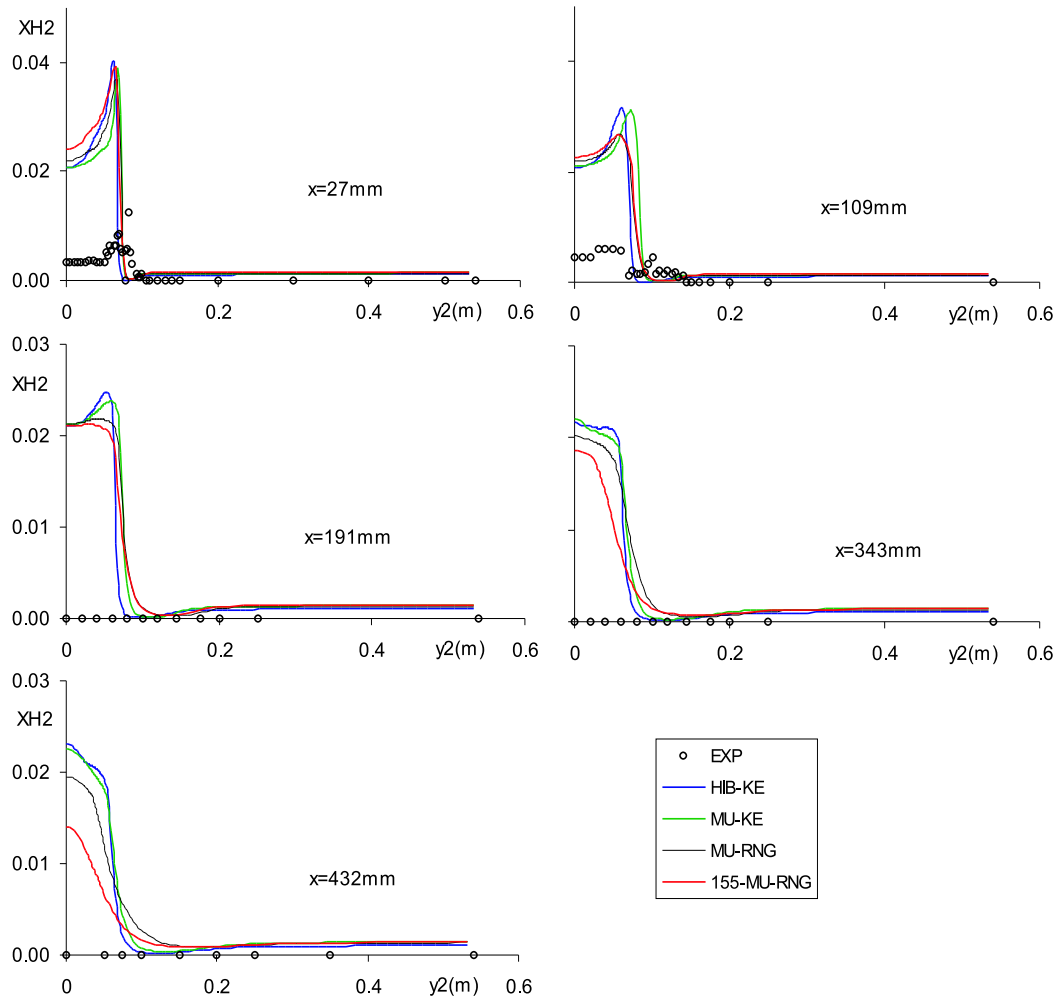


Figura 6.26: Perfis radiais experimentais e calculados da fracção molar seca de H_2 em diferentes valores da coordenada axial.

Capítulo 7

Conclusões

7.1 Trabalho realizado

A simulação numérica duma câmara de combustão alimentada por reagentes sem pré-mistura foi efectuada com base em modelos de escoamento turbulento, reacção química, radiação e interacção entre a composição química e a turbulência, e em métodos numéricos de resolução dos modelos escolhidos.

As bases físicas que fundamentaram os modelos (apresentadas no capítulo 2) consistiram nas equações de transporte da massa, das fracções mássicas das espécies químicas, momento linear e energia, esta na forma de equação de transporte da entalpia. As taxas de criação e destruição de espécies químicas são expressas por meio de expressões bem estabelecidas.

A aplicação dos fundamentos referidos a escoamentos turbulentos com combustão requer a limitação de objectivos no que se refere aos detalhes com que é possível o conhecimento dos fenómenos envolvidos. Nomeadamente, apenas é acessível o cálculo dos valores médios das variáveis dependentes nas equações de transporte e algumas outras variáveis expressas em função das primeiras. Nas equações de transporte das variáveis médias surgem novos termos que não dependem directamente das variáveis anteriormente definidas.

O cálculo destes novos termos é efectuado por intermédio da introdução de modelos que os expressam como funções algébricas de variáveis já definidas. Alternativamente, estes modelos poderão envolver equações de transporte para a determinação dos valores dos

termos desconhecidos surgidos na dedução das equações das variáveis médias. O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ com estas características é apresentado no capítulo 3.

As reacções químicas da combustão são descritas por intermédio de um mecanismo detalhado, para o qual são conhecidas as taxas de reacção das 58 reacções elementares que constituem o mecanismo. Estas taxas são expressas como funções da temperatura e concentrações dos reagentes.

O transporte de energia radiativa é calculado com base num modelo que considera o meio opticamente fino, pelo que só são importantes as trocas entre as fronteiras e o gás, desprezando-se as trocas no interior deste. A potência energética radiativa é introduzida na equação da entalpia como termo fonte.

A possibilidade de calcular as médias das fracções mássicas das espécies presentes no escoamento é limitada. A dependência fortemente não linear das taxas de reacção com a temperatura impede a resolução das equações de transporte das fracções mássicas médias em regime turbulento.

A hipótese de que a chama turbulenta pode, em determinadas condições, considerar-se constituída por pequenas estruturas laminares (*flamelets*) permite ultrapassar o problema do cálculo dos valores médios das taxas de formação das espécies químicas. A composição química das *flamelets* pode ser determinada aproximadamente por intermédio de equações de transporte de uma única variável independente, a fracção de mistura, e de um parâmetro, a taxa de dissipação escalar. Este cálculo é efectuado de acordo com as condições de fronteira da câmara de combustão em estudo.

O conhecimento, em todo o domínio do escoamento, dos valores instantâneos dos parâmetros que definem as *flamelets*, permitiria o conhecimento instantâneo do estado químico de todo o sistema em combustão. Não sendo este conhecimento possível, o conhecimento da probabilidade de existência de valores dos parâmetros Z e χ dentro de pequenos intervalos ΔZ e $\Delta \chi$, em cada ponto do domínio, permite o cálculo dos valores médios de Y_k , já que Y_k instantâneo depende exclusivamente dos valores de (Z, χ) .

As variáveis Z e χ são consideradas estatisticamente independentes e supõe-se que as funções densidade de probabilidade de Z e de χ são uma distribuição de Gauss truncada e uma função delta de Dirac, respectivamente. Os parâmetros que definem a função densidade de probabilidade de Z são determinados por intermédio da solução das equações de transporte da fracção de mistura e da sua variância. Estas são resolvidas em

conjunto com as equações que descrevem o escoamento.

As fracções mássicas médias das espécies químicas em cada ponto do domínio foram calculadas por integração dos valores instantâneos obtidos através da tabela das *flamelets*, ponderados pelas funções densidade de probabilidade referidas.

O cálculo do escoamento foi efectuado pela solução das equações de transporte das componentes cartesianas da velocidade média e por uma equação para cálculo da correcção da pressão. De forma semelhante, a entalpia média foi calculada por resolução de uma equação de transporte, sendo depois utilizada no cálculo da temperatura.

As equações de transporte das variáveis médias foram resolvidas pelo método dos volumes finitos. Dada a irregularidade geométrica das fronteiras da câmara de combustão e queimador, as equações de transporte foram discretizadas em malhas curvilíneas não ortogonais. A forma de efectuar a discretização, os esquemas de cálculo de fluxos e de adaptação das equações nas fronteiras, foram apresentados no capítulo 4. O cálculo da pressão baseou-se na solução de uma equação obtida a partir das equações de transporte da velocidade e de conservação da massa. O método (*SIMPLE*) calcula uma variável de perturbação da pressão que é iterativamente usada para correcção da pressão. O método corrige também as componentes da velocidade, calculando termos que conduzem à conservação da massa no escoamento.

Parte dos modelos descritos no texto e os métodos numéricos apresentados foram testados em escoamentos não reactivos com características diversas. A comparação de resultados com outros publicados permitiu concluir que os métodos são de grande precisão no cálculo de escoamentos laminares, independentemente das características dos escoamentos testados, que incluem escoamentos forçados por pressão e por atrito viscoso, com recirculação e sem recirculação, com diversos valores do número de Reynolds. Para malhas com igual número de nós, o esquema *MUSCL* apresenta uma precisão superior ao esquema híbrido, excepto com malhas muito refinadas, caso em que ambos convergem para os resultados numericamente correctos. Os resultados das simulações de escoamentos turbulentos indicam limitações no modelo de turbulência e provavelmente nas condições de fronteira usadas em escoamentos turbulentos. Para os escoamentos turbulentos sem reacção química aqui analisados, a versão *RNG* do modelo $k - \varepsilon$ de turbulência conduziu a piores resultados do que a versão clássica, independentemente da existência de *swirl*. As condições de fronteira publicadas não são no entanto inteiramente fiáveis, como ad-

mitido por [Zhu e Rodi, 1992] no estudo dum escoamento sem *swirl*. Consideram que as condições de fronteira são, em conjunto com o modelo de turbulência e o método de discretização, as fontes mais importantes de erro. A discrepância nas condições de fronteira utilizadas nos estudos publicados sobre o escoamento experimental com *swirl* de [Roback e Johnson, 1983] mostra a dificuldade na adopção de condições de fronteira inteiramente credíveis. Por estes motivos e pela possível sensibilidade dos resultados às condições de fronteira adoptadas, não é inteiramente seguro concluir-se pelo melhor desempenho de qualquer das duas versões do modelo de turbulência.

A simulação numérica de uma câmara de combustão foi efectuada com utilização dos modelos e métodos já testados em escoamentos não reactivos, aos quais se acrescentam um modelo de radiação e um modelo de interacção das reacções químicas com a turbulência. A comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais revela um acordo razoável. O cálculo do escoamento indica que o modelo $k - \varepsilon$ nas versões utilizadas promove o transporte turbulento do momento linear de forma deficitária, especialmente na sua versão clássica. Estas mesmas características referidas em relação ao transporte de momento linear mantêm-se no que respeita ao transporte de grandezas escalares.

A aplicação do modelo das *flamelets* no cálculo da composição química média conduz a resultados razoáveis, sendo no entanto difícil discernir a influência individual dos diferentes modelos físicos nas discrepâncias observadas entre as previsões e os resultados experimentais. Nas zonas próximas do eixo de simetria e do queimador, as diferenças entre resultados numéricos e experimentais poderão ser essencialmente atribuídas às características insuficientemente difusivas do modelo de turbulência. Na zona da recirculação exterior, os resultados indicam um défice na concentração de CO_2 acompanhado de excesso de CO . Tal poderá dever-se à não inclusão, no cálculo dos valores médios das fracções mássicas, de valores da taxa de dissipação escalar que parecem revelar-se necessários, concretamente os baixos valores de $\tilde{\chi}$ existentes na zona de recirculação externa.

7.2 Propostas de trabalho futuro

O modelo das *flamelets*, cujas equações desprezam termos que são comparativamente pequenos na proximidade das superfícies estequiométricas, parece poder produzir bons resultados no cálculo da composição química mesmo em zonas em que não está à

partida assegurada a menor ordem dos termos referidos. Existe portanto a necessidade de avaliar, analítica ou numericamente, os erros cometidos com a aplicação deste modelo em zonas afastadas das superfícies estequiométricas, calculando os valores dos termos desprezados nas equações das *flamelets* e comparando-os com os pertencentes às equações utilizadas.

A determinação da temperatura a partir da entalpia usando a relação que introduz o termo de correlação entre as derivadas em ordem a Z das entalpias e das fracções mássicas é realizável por meio da introdução destas grandezas numa tabela contendo os valores instantâneos $(Z, \chi) \longrightarrow (Y_k, \frac{\partial h_k}{\partial Z} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} Z''^2)$ calculados pelo modelo das *flamelets* e efectuando a determinação das médias da forma já utilizada. Em alternativa, caso os termos $\frac{\partial h_k}{\partial Z}$ e $\frac{\partial Y_k}{\partial Z}$ se possam considerar constantes para efeito do cálculo dos valores médios, pode usar-se uma expressão aproximada, mais directamente calculável, para a correlação contendo as derivadas.

As insuficiências do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ sugerem a necessidade de alteração dos parâmetros empíricos ou, preferencialmente, a utilização de modelos mais precisos. Na impossibilidade prática da simulação da câmara de combustão estudada usando *LES* em conjunto com mecanismos de reacção química detalhados, uma opção possível consiste na utilização do modelo das tensões de Reynolds para cálculo dos fluxos turbulentos de momento linear.

A utilização do modelo de radiação de meio opticamente fino conduz a erros no cálculo da temperatura que só podem ser corrigidos com a adopção de outro modelo. Um dos modelos que se podem aplicar, garantindo um cálculo mais preciso dos fluxos radiativos, é o modelo das ordenadas discretas. A utilização de modelos de interacção entre radiação e turbulência é igualmente necessária pelo facto de contribuir significativamente para o transporte radiativo.

Para análise mais completa do funcionamento da câmara de combustão estudada é necessária a introdução de modelos de formação de fuligem e óxidos de azoto.

Nomenclatura

Variáveis e parâmetros

A	área
a_B	coeficiente de equação de transporte discretizada
a_C	coeficiente de equação de transporte discretizada
a_E	coeficiente de equação de transporte discretizada
a_{ki}	parâmetro em polinómio para cálculo de \tilde{h}_k
a_m	coeficientes em algoritmo SIMPLE
a_N	coeficiente de equação de transporte discretizada
a_P	coeficiente de equação de transporte discretizada
a_{Pk}	coeficiente de absorção médio de Planck da espécie k
a_S	coeficiente de equação de transporte discretizada
a_W	coeficiente de equação de transporte discretizada
a_{kj}	coeficientes em polinómio de cálculo da entalpia da espécie k
b	termo em equação de transporte discretizada
B	parâmetro em perfil "exacto" de variável
B_n	constante na equação de Arrhenius
B_{ij}	coeficiente de transformação de coordenadas
b_{ij}	coeficiente de transformação de coordenadas discretizadas
C	parâmetro em perfil "exacto" de variável
C	parâmetro empírico em cálculo de viscosidade
C_1	mecanismo de reacção incluindo compostos de carbono com um máximo de um átomo deste elemento por molécula
C_1	constante de modelo de turbulência
C_2	constante de modelo de turbulência
C_i	coeficiente de transformação de coordenadas discretizadas
C_C	parâmetro empírico em modelo de interacção de turbulência com reacção química
C'_i	termo fonte em equação de transporte transformada
C_k	concentração molar da espécie k
C_μ	parâmetro empírico de modelo de turbulência
c_n	coeficientes de cálculo da emissão radiativa de uma espécie química

c_n	coeficientes em polinómio para cálculo de componente da velocidade
$c_{p,k}$	calor específico a pressão constante da espécie k
C_χ	parâmetro em expressão da média de χ
d	distância
d_n	coeficientes em polinómio para cálculo de componente da velocidade
D	coeficiente de difusão
D	coeficiente de termo difusivo discretizado
D_k	coeficiente de difusão da espécie k em relação à mistura gasosa
D_{ij}	coeficiente de transformação de coordenadas discretizadas
Da	número de Damkholer
E	parâmetro de lei de turbulência na parede
E_g	poder emissivo do corpo negro
E_k	espécie química k
$E_{a,n}$	energia de activação da reacção n
e	energia específica
F_i	componente i da força volúmica
F_i	fluxo de massa discretizado em coordenadas curvilíneas
G	taxa de geração de energia cinética turbulenta
h	entalpia
H_P	coeficiente em método <i>SIMPLE</i>
I	intensidade de turbulência
I	intensidade da radiação
I_f	fluxo de variável dependente discretizada
J	jacobiano de transformação de coordenadas
$j_{\phi,i}$	fluxo da variável ϕ na direcção y_i
k	energia cinética turbulenta
k_a, k_d	coeficientes de absorção e dispersão radiativa
k_{d_n}	constante da taxa de reacção directa da n -ésima reacção química
k_{i_n}	constante da taxa de reacção inversa da n -ésima reacção química
l	parâmetro empírico de distância
L	parâmetro empírico de distância
Le	número de Lewis
M_k	massa molar da espécie k
n	coordenada perpendicular a parede
p	pressão
p'	correção da pressão
p_k	pressão parcial da espécie k
P	função densidade de probabilidade
Pe	número de Peclet
Pr	número de Prandtl

Q	soma de resíduos normalizados
Q	energia térmica
Q_{ji}	coeficiente em método <i>SIMPLE</i>
q_R	termo fonte radiativo
r	distância a eixo de simetria
R	constante dos gases perfeitos
R	termo da equação de transporte de ε no modelo $k - \varepsilon - GRN$
R	termo de ordem menor em equação das <i>flamelets</i>
R	resíduo
R	distância a eixo de simetria
Re	número de Reynolds
Re_t	número de Reynolds turbulento
rel	coeficiente de relaxação
S	tensor das deformações
S	termo fonte discretizado
S	número de <i>swirl</i>
S_{ij}	elemento do tensor S
s_ϕ	termo fonte da grandeza ϕ nas equações de transporte
S	termo fonte integrado
S_P	coeficiente de termo fonte linearizado
S_C	coeficiente de termo fonte linearizado
Sc	número de Schmidt
t	tempo
T	temperatura
U_i	fluxo de massa discretizado
U_0	velocidade de referência
u_i	componente cartesiana da velocidade
u'_i	correção de u_i
u^+	velocidade adimensional em função de parede
u_{par}	componente de velocidade paralela a parede
V	volume
$V_{k,i}$	componente i da velocidade de difusão da espécie química k em relação à mistura gasosa
w	componente angular da velocidade
W	grandeza de modelo de turbulência
X	conjunto de variáveis e parâmetros incluídos no cálculo de variável dependente discretizada
X_k	fracção molar seca da espécie química k
x	coordenada em câmara de combustão
x_i	coordenadas curvilíneas

y_i	coordenadas cartesianas
y^+	distância adimensional
Y_k	fracção mássica da espécie química k
Z	fracção de mistura
Z_k	coordenada paralela à superfície estequiométrica
α	difusividade térmica
α_n	constante na equação de Arrhenius
β	parâmetro da equação de transporte de ε no modelo $k - \varepsilon - GRN$
β_{ij}	coeficiente de transformação de coordenadas
δ	quociente entre distâncias
ε	taxa de dissipação de k
ε	erro relativo percentual médio
$\Delta h_{f,k}^0$	entalpia de formação da espécie k
ϕ	variável dependente genérica em equação de transporte
ϕ'	variação em relação à média na decomposição de Reynolds
ϕ''	variação em relação à média na decomposição de Favre
Γ	coeficiente de difusão
η	parâmetro da equação de transporte de ε no modelo $k - \varepsilon - RNG$
η_0	parâmetro da equação de transporte de ε no modelo $k - \varepsilon - RNG$
κ	constante de Von Karman
λ	condutividade térmica
λ	coeficiente de interpolação
μ	coeficiente laminar de viscosidade dinâmica
μ	parâmetro em função densidade de probabilidade
μ_t	coeficiente turbulento de viscosidade dinâmica
ν	coeficiente laminar de viscosidade cinemática
ν_{kn}, ν'_{kn}	coeficientes estequiométricos da espécie k na equação química n
χ	taxa de dissipação escalar
ρ	massa volúmica
$\dot{\rho}_k^g$	taxa de geração química da massa volúmica da espécie k
σ	parâmetro em função densidade de probabilidade
σ	constante de Stefan-Boltzmann
θ	ângulo
τ	tempo
τ	escala de tempo
τ	tensão
τ_{ji}	elemento do tensor das tensões
Ψ	função corrente
Ψ_m	função corrente de massa
ω	vorticidade
ω	frequência
ω_{ij}	coeficiente de transformação de derivadas de velocidade discretizada
$\vec{\Omega}$	direcção espacial

Índices

A	ambiente
B	nó de malha
b	face de malha
C	nó de malha
C	convecção
c	face de malha
D	difusão
E	nó de malha
e	face de malha
est	valor estequiométrico
f	face de malha
F	nó de malha
g	gás
k	energia cinética turbulenta
J	jacto
N	nó de malha
m	nó vizinho
max	máximo
min	mínimo
n	face de malha
P	nó de malha
p	face de malha
q	valor de extinção
R	radiação
rad	radiação
S	nó de malha
s	face de malha
t	turbulento
W	nó de malha
w	face de malha
Z	fracção de mistura
$+$	montante
$-$	jusante
$*$	valor estimado
0	inicial
0	de referência
α	índice mudo
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
μ	viscosidade

Siglas

<i>ADI</i>	Alternating-Direction Implicit
<i>BERL</i>	Burner Engeneering Research Laboratory
<i>EBU</i>	Eddy Break-Up
<i>EDC</i>	Eddy Dissipation Concept
<i>EDM</i>	Eddy Dissipation Model
<i>EXP</i>	Experimental
<i>f.d.p.</i>	função densidade de probabilidade
<i>HIB</i>	esquema Híbrido
<i>KE</i>	modelo de turbulência $k - \varepsilon$ clássico
<i>LES</i>	Large Eddy Simulations
<i>MU</i>	esquema MUSCL
<i>MUSCL</i>	Monotone Upstream-centered Schemes for Consevation Law
<i>Oos</i>	Oosterlee
<i>QUICK</i>	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics
<i>RNG</i>	Renormalization Group
<i>RNG</i>	versão de modelo de turbulência $k - \varepsilon$ com aplicação da teoria do grupo de renormalização
<i>SCAL</i>	Simmetric Coupled Alternating Lines
<i>SIMPLE</i>	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
<i>SOUCUP</i>	Second Order Upwind Central differencing first order Upwind
<i>TDMA</i>	Tri-Diagonal Matrix Algorithm
<i>ZRE</i>	Zona de Recirculação Externa
<i>ZRI</i>	Zona de Recirculação Interna

Operadores matemáticos

f	função
L	operador de equação de transporte
max	operador de máximo
M	operador do esquema híbrido
δ	função de Dirac
δ_{ij}	operador de kronecker
\sim	média de Favre
$—$	média de Reynolds
\wedge	normalização de variável
\in	pertence a intervalo
$]$	limite de intervalo fechado à direita ou aberto à esquerda
$[$	limite de intervalo fechado à esquerda ou aberto à direita
\cdot	derivada em ordem ao tempo

Bibliografia

- [Abou-Ellail *et al.*, 1977] M. M. Abou-Ellail, A D. Gosman, F. C. Lockwood, I. E. Megahed, "A three dimensional procedure for combustion chamber flows", AIAA 15th Aerospace Sci. Meeting, Los Angeles, Paper 77-138, 1977.
- [Arrhenius, 1889] S. Arrhenius, "Über die reaktionsgeschwindigkeit bei der inversion von rohrzucker durch sauren", Z. Phys. Chem., vol. 4, p. 226-248, 1889.
- [Bilger, 1980] R. W. Bilger, "Turbulent flows with nonpremixed reactants", in Turbulent Reactive Flows, ed. P. A. Libby, F. A. Williams, Springer, New York, 1980.
- [Bilger *et al.*, 1990] R. Bilger, S. Starner, R. Kee, "On reduced mechanisms for methane-air combustion in nonpremixed flames", Combust. Flame, vol. 80, p. 135-149, 1990.
- [Boussinesq, 1877] J. Boussinesq, "Essai sur la théorie des eaux courantes", Mémoires présents par divers savants à l'Académie des Sciences, vol.23, p. 1-680, Paris, 1877.
- [Bowman, 1992] C. T. Bowman, "Control of combustion-generated nitrogen oxide emissions: Technology driven by regulation", 24th Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 859-878, 1992.
- [Burke e Schumann, 1928] S. P. Burke, T. E. Schumann, "Diffusion flames", Indust. Eng. Chem., vol. 20, p. 998-1005, 1928.
- [Carvalho *et al.*, 1988] M. G. Carvalho, P. Oliveira, V. Semião, "A three dimensional modelling of an industrial glass furnace", J. Institute Energy, vol. 61, p. 143-156, 1988.
- [Chan *et al.*, 1998] S. H. Chan, J. Q. Yin, B. J. Shi, "Structure and extinction of methane-air flamelet with radiation and detailed kinetic mechanism", Comb. Flame, vol. 112, p. 445-456, 1998.
- [Chandrasekhar, 1950] S. Chandrasekhar, "Radiative transfer", Oxford University Press, London, 1950.
- [Chen, 1997] J. Y. Chen, "Development of reduced mechanisms for numerical modelling of turbulent combustion", Workshop on Numerical Aspects of Reduction in Chemical Kinetics, CERMICS-ENPC, Champs sur Marne, França, 1997.

- [Coelho e Carvalho, 1993] P. J. Coelho, M. G. Carvalho, "Application of a domain decomposition technique to the mathematical modelling of a utility boiler", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, vol.36, p. 3401-3419, 1993.
- [Coelho, 1999] Coelho, P.J. "Parallel Simulation of a Utility Boiler. Part I. Mathematical Model and Numerical Solution Method", *Communications in Numerical Methods in Engineering*, vol. 15, p. 717-726, 1999.
- [Coelho *et al.*, 2002] P. J. Coelho, O. J. Teerling, D. Roekaerts, "Spectral radiative effects and turbulence-radiation-interaction in Sandia flame D", in *TNF6_Proceedings.pdf*, 2002.
- [Courant *et al.*, 1952] R. Courant, E. Isaacson, M. Rees, "On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by finite differences", *Comm. Pure Appl. Math.*, vol. 5, p. 243-255, 1952.
- [Darwish e Moukalled, 1994] M. Darwish, F. Moukalled, "Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes", *Num. Heat Transfer, part B*, vol. 26, p. 79-96, 1994.
- [Demirdzic, 1982] I. A. Demirdzic, "A finite volume method for computation of fluid flow in complex geometries", PhD thesis, University of London, 1982.
- [Demirdzic *et al.*, 1992] I. A. Demirdzic, Z. Lilek, M. Peric, "Fluid flow and heat transfer test problems for non-orthogonal grids: bench-mark solutions", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, vol. 10, p. 329-354, 1992.
- [Dibble *et al.*, 1987] R. W. Dibble, A. R. Masri, R. W. Bilger, "The spontaneous Raman scattering technique applied to nonpremixed flames of methane", *Comb. Flame*, vol. 67, p. 189-206, 1987.
- [Van Doormal e Raithby, 1984] J. P. van Doormal, G. D. Raithby, "Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows", *Numer. Heat Transfer*, vol.7, p. 147-163, 1984.
- [Durbin, 1995] P. A. Durbin, "Separated flow computations with the $k - \varepsilon - v^2$ model", *AIAA J.*, vol. 33, p. 659-664, 1995.
- [Durst e Wennerberg, 1991] F. Durst, D. Wennerberg, "Numerical aspects of calculation of confined swirling flows with internal recirculation", *Int. J. for Num. Methods in Fluids*, vol.12, p. 203-224, 1991.
- [Euler, 1755] L. Euler, "Institutiones calculi differentialis cum eius usu in analysi finitorum ac doctrina serium, Pars II.1. De transformatione serium", *Academia Imperialis Scientiarum Petropolitana*, 1755.
- [Favre, 1965] A. Favre, "Equations des gaz turbulents compressibles", *J. Mechanique*, vol. 4, p. 361-390, 1965.

- [Ferziger e Peric, 2002] J. H. Ferziger, M. Peric', "Computational methods for fluid dynamics", Springer, Berlim, 2002.
- [Fiveland, 1982] W. A. Fiveland, "A discrete ordinates method for predicting radiative heat transfer in axisymmetric enclosures", ASME paper 82-HT-20, 1982.
- [Fiveland *et al.*, 1996] W. A. Fiveland, K. C. Kaufman, J. P. Jessee, "Validation of an industrial flow and combustion model", National Heat Transfer Conference, Houston, E. U. A., 1996.
- [Fromm e Harlow, 1963] J. E. Fromm e F H. Harlow, "Numerical solution of the problem of vortex street development ", Phys. of Fluids, vol. 6, p. 975-982, 1963.
- [Gordon e McBride, 1971] S. Gordon, B. J. McBride, "Computer program for calculation of complex equilibrium composition, rocket performance, incident and reflected shocks and Chapman-Jouguet detonations", SP-273, NASA, 1971.
- [Gosman *et al.*, 1980] A. D. Gosman, F. C. Lockwood, I. E. Megahed, N. G. Shah, "The prediction of the flow, reaction and heat transfer in the combustion chamber of a glass furnace", AIAA 18th Aerospace Sciences Meeting, Pasadena, E.U.A., p. 14-46, 1980.
- [Gottlieb e Orszag, 1977] D. Gottlieb, S. A. Orszag, "Numerical analysis of spectral methods: theory and applications", SIAM, Filadélfia, E.U.A., 1977.
- [Grunert *et al.*, 1996] K. Grunert, B. Younis, T. Rung, "A second-order closure study of co-axial turbulent swirling jets", 6th Int. Symp. of Flow Modeling and Turbulence Measurements, Tallahassee, E.U.A., 1996.
- [Hanjalic, 1970] K. Hanjalic, "Two dimensional asymetrical turbulent flow in ducts", Ph. D. thesis, Universidade de Londres, 1970.
- [Hanjalic e Launder, 1972] K. Hanjalic, B. E. Launder, "A Reynolds stress model of turbulence and its application to thin shear", J. Fluid Mech., vol. 52, p. 609-638, 1972.
- [Harlow e Welch, 1965] F H. Harlow, J. E. Welch, "Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface", Phys. Fluids, vol. 8, p. 2182-2189, 1965.
- [Harlow e Nakayama, 1967] F. H. Harlow, P. I. Nakayama, "Turbulent transport equations", Phys. Fluids, vol. 10, p. 2323-2328, 1967.
- [Hawthorne *et al.*, 1949] W. R. Hawthorne, D. S. Weddell, H. C. Hottel, "Mixing and combustion in turbulent jets", Third Symp. (Int.) on Comb., Flame and Explosion Phenomena, Williams and Wilkins, p. 266-288, 1949.
- [Hirt *et al.*, 1974] C. W. Hirt, A. A. Amsden, J. L. Cook, "An arbitrary lagrangean-eulerian computing method for all flow speeds", J. Comp. Physics, vol. 14, p. 227-253, 1974.

- [Hottel e Cohen, 1958] H. C. Hottel, E. S. Cohen, "Radiant heat exchange in a gas-filled enclosure: allowance for nonuniformity of gas temperature", *AIChE Journal*, vol. 4, p. 3-14, 1958.
- [Hutchinson *et al.*, 1977] P. Hutchinson, E. E. Khalil, J. H. Whitelaw, "Measurement and calculation of furnace flow properties", *J. Energy*, vol. 1, p. 212, 1977.
- [Hwang e Jaw, 1998] R. R. Hwang, S. Y. Jaw, "Second-order closure turbulence models: their achievements and limitations", *Proc. Natl. Sci. Counc. ROC(A)*, vol. 22, p. 703-722, 1998.
- [Issa, 1986] R. I. Issa, "Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting", *J. Comput. Phys.*, vol. 62, p. 40-65, 1986.
- [Jakirlic *et al.*, 2001] S. Jakirlic, R. Jester-Zurker, C. Tropea, 9th ERCOF-TAC/IAHR/COST Workshop on Refined Turbulence Modelling, Darmstadt, Alemanha, 2001.
- [Jessee e Fiveland, 1995] J. P. Jessee, W. A. Fiveland, "A non-orthogonal combustion model for natural gas flames", *Proc. of the 3rd Int. Conf. on Comb. Technologies for a Clean Environment*, Lisboa, 1995.
- [Jessee *et al.*, 1997] J. Jessee, R. Gansman, W. Fiveland, "Multi-dimensional analysis of turbulent natural gas flames using detailed chemical kinetics", *Comb. Sci. and Tech.*, vol. 129, p. 113-140, 1997.
- [Jones, 1979] W. P. Jones, "Models for turbulent flows with variable density", VKI Lecture Series 1979, in *Prediction Methods for turbulent flows*, W. Kollmann (Ed.), Hemisphere Publ. Corp., New York, 1980.
- [Jones e Launder, 1972] W. P. Jones, B. E. Launder, "The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 15, p. 301-314, 1972.
- [Jones e Whitelaw, 1982] W. P. Jones, J. H. Whitelaw, "Calculation methods for reacting turbulent flows: a review", *Combustion and flame*, vol 48, p. 1-26, 1982.
- [Kaufman *et al.*, 1994] K. Kaufman, W. Fiveland, A. Peters, R. Weber, "The BERL 300kW unstaged gas flames with a swirl-stabilized burner", contract no. 5093-260-2729, Gas Research Institute, 1994.
- [Kaufman *et al.*, 1997] K. Kaufman, W. Fiveland, N. Fornaciari, P. Goix, P. M. Walsh, "Developing a benchmark for natural gas combustion models", 4th Int. Conf. Technol. Comb. Clean Environment, Lisboa, 1997.
- [Kian, 1981] K. Kian, "Jets confinés dans un divergent", Thèse de docteur-ingénieur, Université Scientifique et Médicale et Institut National Polytechnique de Grenoble, 1981.

- [Kolmogorov, 1942] A. N. Kolmogorov, "Equações do movimento turbulento dum fluido incompressível", *Izv. Akad. Nauk. URSS, Ser. Fiz.*, vol. 6, p. 56-58, 1942.
- [Kolmogorov, 1962] A. N. Kolmogorov, "A refinement of previous hypothesis concerning the local structure of turbulence in a viscous incompressible fluid at high Reynolds number", *J. Fluid Mech.* 13, p. 82-85, 1962.
- [Kuo, 1986] K. K. Kuo, "Principles of combustion", John Wiley & Sons, New York, 1986.
- [Van Leer, 1977] B. van Leer, "Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Goudonov method", *J. Comput. Phys.*, vol. 23, p. 101-136, 1977.
- [Lentini, 1994] D. Lentini, "Assessment of the stretched laminar flamelet approach for nonpremixed turbulent combustion", *Combust. Sci. and Tech.*, vol. 100, p. 95-122, 1994.
- [Leonard, 1974] A. Leonard, "Energy cascade in large eddy simulations of turbulent fluid flows", *Adv. Geophys.*, 18A, p. 237-248, 1974.
- [Leonard, 1979] B. P. Leonard, "A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation", *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 19, p. 59-98, 1979.
- [Leonard, 1988] B. P. Leonard, "Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, vol. 8, p. 1291-1318, 1988.
- [Libby e Williams, 1994] P. A. Libby, F. A. Williams, "Turbulent reacting flows", Academic Press, London, 1994.
- [Liew *et al.*, 1981] S. K. Liew, K. N. C. Bray, J. B. Moss, "A flamelet model of turbulent non-premixed combustion", *Combustion Science and Technology*, vol. 27, p. 69-73, 1981.
- [Lin, 1998] C. A. Lin, "Modeling a confined swirling coaxial jet", *Ann. Research Briefs, Center for Turbulent Research, Stanford, E.U.A.*, p. 211-219, 1998.
- [Lin e Leschziner, 1989] C. A. Lin, M. A. Leschziner, "Computation of three-dimensional injection in swirling combustor model with second-moment closure", *Proc. 6th Int. Conf. Num. Meth. in Laminar and Turb. Flows, Swansea, Grã-Gretanha*, p. 1711-1725, 1989.
- [Lindstedt, 1994] P. Lindstedt, "Soot formation in combustion—mechanisms and models", ed. H. Bockhorn, Springer, Berlim, 1994.
- [Lockwood e Naguib, 1975] C. Lockwood, A. S. Naguib, "The prediction of the fluctuations in the properties of free, round-jet, turbulent, diffusion flames", *Combustion and Flame*, vol. 24, p. 109-124, 1975.

- [Lockwood e Shah, 1981] F. C. Lockwood, N. Shah, "A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures", 18th Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, p. 1405-1414, 1981.
- [Magnussen e Hjertager, 1976] B. F. Magnussen, B. H. Hjertager, "On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion", 16th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, p. 719-729, 1976.
- [Magnussen, 1981] B. F. Magnussen, "On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow", 19th AIAA Aerospace Science Meeting, St. Louis, E.U.A., 1981.
- [Mallard e LeChatelier, 1883] E. Mallard, H. LeChatelier, Ann. Mines, vol. 8, p. 274, 1883.
- [Marco e Lockwood, 1975] A. G. Marco, F. C. Lockwood, "A new flux model for the calculation of radiation in furnaces", La Rivista dei Combustibili, vol.29, p. 184-196, 1975.
- [Menon *et al.*, 2000] S. Menon, C. Stone, B. Sekar, "Simulation of combustion dynamics in gas turbine combustors", High Performance Computing User's Conf., Albuquerque, E. U. A., 2000.
- [Meyers e O'Brien, 1981] R. E. Meyers, E. E. O'Brien, "The joint pdf of a scalar and its gradient at a point in a turbulent fluid", Combust. Sci. Technol., vol. 26, p. 123-134, 1981.
- [Miller *et al.*, 1984] J. A. Miller, R. J. Kee, M. D. Smooke, J. F. Grear, "The combustion of the structure and extinction limit of a methane-air stagnation point diffusion flame", The Combustion Institute, Paper WSS/CI 84-10, 1984.
- [Modest, 1993] M. F. Modest, "Radiative heat transfer", McGraw-Hill Int. Ed., 1993.
- [Napolitano e Orlandi, 1985] M. Napolitano, P. Orlandi, "Laminar flow in a complex geometry: a comparison", Int. J. for Num. Meth. In Fluids, vol. 5, p. 667-683, 1985.
- [Navier, 1827] M. Navier, "Mémoire sur les lois du mouvement des fluides", Mém. de l'Acad. de Sci., vol. 6, p 389-416, 1827.
- [Newton, 1687] I. Newton, Philosophiae naturalis principia mathematica", Londres, 1687.
- [Oosterlee *et al.*, 1993] C. Oosterlee, P. Wesseling, A. Segal, P. Brakkee, "Benchmark solutions for the incompressible Navier-Stokes equations in general co-ordinates on staggered grids", Int. J. for Num. Meth. in Fluids, vol.17, p. 301-321, 1993.
- [Ozisik, 1973] M. N. Ozisik, "Radiative transfer and interactions with conduction and convection", John Wiley and Sons, New York, 1973.

- [Papageorgakis e Assanis, 1999] G. C. Papageorgakis, D. N. Assanis, "comparison of linear and nonlinear RNG-based $k-\varepsilon$ models for incompressible turbulent flows", Num. Heat Transfer, Part B, vol. 35, p. 1-22, 1999.
- [Patankar, 1980] S. V. Patankar, "Numerical heat transfer and fluid flow", McGraw-Hill, 1980.
- [Patankar e Spalding, 1972] S. V. Patankar, D. B. Spalding, "A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 15, p. 1787-1806, 1972.
- [Patankar e Spalding, 1973] S. V. Patankar, D. B. Spalding, "A computer model for three-dimensional flow in furnaces", 14th Symp. (Int.) on Comb., The Combustion Institute, p. 605-614, 1973.
- [Peaceman e Rachford, 1955] D. W. Peaceman, H. H. Rachford, "The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations", J. Soc. Ind. Appl. Math., vol. 3, p. 28-41, 1955.
- [Pember *et al.*, 1996] R. B. Pember, P. Colella, L. H. Howell, A. S. Almgren, J. B. Bell, W. Y. Crutchfield, V. E. Beckner, K. C. Kaufman, W. A. Fiveland, J. P. Jessee, "The modeling of a laboratory natural gas-fired furnace with a higher-order projection method for unsteady combustion", 26th Int. Symp. Comb., Nápoles, Itália, 1996.
- [Peric, 1985] M. Perić, "A finite volume method for the prediction of three-dimensional fluid flow in complex ducts", PhD thesis, Imperial College, Londres, 1985.
- [Peters, 1983] N. Peters, "Local quenching due to flame stretch and non-premixed turbulent combustion", Combust. Sci. Technol., vol. 30, p. 1-17, 1983.
- [Peters, 1984] N. Peters, "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion", Prog. Energy Combust. Sci., vol. 10, p. 319-339, 1984.
- [Peters e Kee, 1987] N. Peters, R. J. Kee, "The Computation of Stretched Laminar Methane-Air Diffusion Flames Using a Reduced Four-Step Mechanism", Combust. Flame, vol. 68, p. 17-29, 1987.
- [Piquet, 1999] J. Piquet, Turbulent flows, models and physics, Springer-Verlag, 1999.
- [Pitsch e Peters, 1998] H. Pitsch, N. Peters, "Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames", 27th Symp. (Int.) on Combustion, The Comb. Inst., p. 1057-1064, 1998.
- [Poisson, 1831] S. Poisson, "Mémoire sur les équations générales de l'équilibre et du mouvement des corps solides élastiques et des fluides", J. de l'École Polytechnique, vol. 13, p. 139-186, 1831.

- [Prandtl, 1925] L. Prandtl, "Uber die ausgebildete turbulenz", Zeitschrift fur angewandte Mathematik und Mechanik, vol. 5, p. 136-139, 1925.
- [Prandtl, 1945] L. Prandtl, "Uber ein neues formelsystem fur die ausgebildete turbulenz", Nachr. Akad. Wiss., Gottingen, Alemanha, 1945.
- [Pun e Spalding, 1967] W. M. Pun, D. B. Spalding, "A procedure for predicting the velocity and temperature distributions in a confined, steady, turbulent, gaseous diffusion flame", Proc. 18th Int. Aeronautic Congress, Belgrado, 1967.
- [Reynolds, 1895] O. Reynolds, "On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion", Philosophical Transactions of the Royal Society of London, series A, vol. 186, p. 123-164, 1895.
- [Rhie, 1981] C. M. Rhie, "A numerical study of the flow past an isolated airfoil with separation", PhD thesis, dept. of Mech. and Ind. Eng., University of Illinois, EUA, 1981.
- [Roback e Johnson, 1983] R. Roback, B. V. Johnson, "Mass and momentum turbulent transport experiments with confined swirling co-axial jets", NASA CR-168252, 1983.
- [Rodi, 1972] W. Rodi, "The prediction of free turbulent boundary layers by use of a two-equation model of turbulence", Ph. D. dissertation, Imperial College, Londres, 1972.
- [Rubin e Khosla, 1982] S. G. Rubin, P. K. Khosla, "Polynomial interpolation method for viscous flow calculations", J. Comput. Phys., vol. 27, p. 153-168, 1982.
- [Saint Venant, 1843] B. de Saint Venant, "Note à joindre au mémoire sur la dynamique des fluides", Comptes Rendus Acad. Sci., vol. 17, p. 1240-1244, 1843.
- [Seshadri e Peters, 1988] K. Seshadri, N. Peters, "Asymptotic structure and extinction of methane-air diffusion flames", Combust. Flame, vol. 73, p. 23-44, 1988.
- [Schlichting, 1979] H. Schlichting, "Boundary-layer theory", McGraw-Hill, 1979.
- [Silva e Coelho, 2002] O. Silva, P. J. Coelho, "Numerical simulation of a natural-gas-fired combustion chamber", 6th Euro. Conf. Ind. Furn. Boil., Estoril, Portugal, 2002.
- [Smith e Reynolds, 1992] L. M. Smith, W. C. Reynolds, "On the Yakhot-Orszag renormalization group method for deriving turbulence statistics and models", Physics of Fluids, vol. 4, p. 364-390, 1992.
- [Smooke, 1991] M. D. Smooke, "Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames", Lecture notes in physics 384, Springer, Nova Iorque, 1991.
- [Smoot e Smith, 1985] L. D. Smoot, P. J. Smith, "Coal combustion and gasification", Plenum, 1985.

- [Song e Viskanta, 1987] T. H. Song, R. Viskanta, "Interaction of radiation with turbulence: application to a combustion system", J. Thermophysics, vol. 1, p. 56-62, 1987.
- [Spalding, 1971a] D. B. Spalding, "Concentration fluctuations in a round turbulent free jet", Chemical Engineering Science, vol. 26, p. 95-107, 1971.
- [Spalding, 1971b] D. B. Spalding, "Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames", 13th Symp. (Int.) Comb., The Comb. Institute, Pittsburgh, p. 649-657, 1971.
- [Stokes, 1845] G. Stokes, "On the theories of internal friction of fluids in motion", Trans. Cambr. Phil. Soc., vol. 8, p. 287-305, 1845.
- [Submodels, 1998] <http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop/Submodels.html>, 1998.
- [Thomas, 1949] L. H. Thomas, "Elliptic problems in linear difference equations over a network", Watson Sci. Comput. Lab. Report, Columbia University, Nova Iorque, 1949.
- [Thompson e Ferziger, 1989] M. C. Thompson, J. H. Ferziger, "An adaptative multigrid technique for incompressible Navier-Stokes equations", J. Comput. Phys., vol. 82, p. 94-121, 1989.
- [Versteeg e Malalasekera, 1995] H. K. Versteeg, W. Malalasekera, An introduction to computational fluid dynamics, Longman, Inglaterra, 1995.
- [Warnatz *et al.*, 1996] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, Combustion, Spriger, Berlim, 1996.
- [Williams, 1975] F. Williams, em "Turbulent mixing in non-reactive and reactive flows", ed. S. Murthy, Plenum, Londres, 1975.
- [Williams, 2001] B. Williams, "Sensitivity of calculated extinction strain rate to molecular transport formulation in nonpremixed counterflow flames", Comb. Flame, vol. 124, p. 330-333, 2001.
- [Wittig *et al.*, 1988] S. Wittig, H. J. Bauer, B. Noll, "On the application of finite-difference techniques for the computation of the flow field in gas turbine combustors with complex geometries", AGARD-CP-422, paper 28, 1988.
- [Yakhot e Orszag, 1986] V. Yakhot, S. A. Orszag, "Renormalization group analysis of turbulence", J. of Scientific Computing, vol. 1, p. 3-57, 1986.
- [Yakhot e Smith, 1992] V. Yakhot, L. Smith, "The renormalization group, the ε expansion, and derivation of turbulence models", J. Sci. Comput., vol. 7, p. 35-61, 1992.
- [Zeldovich, 1940] Y. B. Zeldovich, "A teoria da propagação e detonação em sistemas gasosos", Zh. Eksp. Teor. Fiz., vol. 10, p. 542-568, 1940.

- [Zhu e Rodi, 1992] J. Zhu, W. Rodi, "Computation of axisymmetric confined jets in a diffuser", Int. J. for Num. Meth. in Fluids", vol. 14, p. 241-251, 1992.
- [Zienkiewicz e Taylor, 1991] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, "The finite element method", vol. 2, McGraw-Hill, Nova Iorque, 1991.
- [Zuber, 1972] I. Zuber, "Um modelo matemático de câmara de combustão", Staatliches Forschungsinstitut fuer maschinenbau, Bechovice, Checoslováquia, 1972.